修 士 学 位 論 文

題 名 湯川型Thomas-Fermi模型
および関連模型の数学解析

指導教員 倉田 和浩 教授

２０２０年１月９日提出

首都大学東京大学院

理学研究科 数理科学 専攻

氏 名 山口 浩人

学位論文要旨 (修士 (理学))

論文著者名　山口 浩人

論文題名 : 湯川型 Thomas-Fermi 模型および関連模型の数学解析

Thomas-Fermi 模型 (以下 TF 模型と呼ぶ) は, 原子番号の大きい原子の電子全体の粒子密度 $\rho(x)$ についての近似的な理論である. TF 模型についての数学的に厳密な詳細, 広範な考察は, すでに Lieb, Simon の [1] にある. TF 模型では原子核・電子間の引力も電子相互の斥力もクーロン相互作用としているが, 本論文ではどちらも湯川型相互作用とした湯川型 Thomas-Fermi 模型 (以下 YTF 模型と呼ぶ) を考察した. 物理的な設定として妥当ではないかもしれないが, たとえば金属結晶中の正イオン・伝導電子間の引力や伝導電子間の斥力が湯川型相互作用で近似できるのは知られている [2].

以下に YTF 模型の電子全体の粒子密度 $\rho(x)$ についてのエネルギー汎関数 $\mathscr{E}_\alpha(\rho)$ を与える.

$$\mathscr{E}_\alpha(\rho) := \frac{3}{5}\int_{\mathbb{R}^3}\rho(x)^{\frac{5}{3}}dx - \int_{\mathbb{R}^3}\rho(x)\frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|}dx + \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3}\rho(x)\rho(y)\frac{e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dxdy,\ \rho\in\mathscr{T} := \{\rho\in L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3)|\rho\geq 0\}.$$

Z は原子核の電荷を表す正定数, α は湯川相互作用の減衰距離の逆数を意味する正定数である. 以下を定める.

$$\mathscr{E}_{\alpha,K}(\rho) := \frac{3}{5}\int_{\mathbb{R}^3}\rho(x)^{\frac{5}{3}}dx,\ \ \mathscr{E}_{\alpha,A}(\rho) := -\int_{\mathbb{R}^3}\rho(x)\frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|}dx,\ \ D_\alpha(f,g) := \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3}f(x)g(y)\frac{e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dxdy.$$

エネルギー汎関数 $\mathscr{E}_\alpha(\rho)$ は運動エネルギー項 $\mathscr{E}_{\alpha,K}(\rho)$, 原子核・電子間引力湯川ポテンシャルエネルギー項 $\mathscr{E}_{\alpha,A}(\rho)$, 電子間斥力湯川ポテンシャルエネルギー項 $D_\alpha(\rho,\rho)$ の 3 つの項からなる. 電子の総量 $\int_{\mathbb{R}^3}\rho(x)dx$ は連続量と考える. TF 模型のエネルギー汎関数は $\alpha=0,\ \rho\in\mathscr{T}_0 := \{\rho\in\mathscr{T}\cap L^1(\mathbb{R}^3)\}$ としたものであることは知られている. 変分問題 $E_\alpha := \inf\{\mathscr{E}_\alpha(\rho)|\rho\in\mathscr{T}\}$ と $E_\alpha(\lambda) := \inf\{\mathscr{E}_\alpha(\rho)|\rho\in\mathscr{T}, ||\rho||_{L^1(\mathbb{R}^3)}=\lambda\geq 0\}$ を考え次の 4 つの定理と 1 つの命題を証明することができた.

定理 1　$\alpha>0$ を固定したとき E_α とそのミニマイザー ρ_α について次が成り立つ.

(1) E_α はただ 1 つのミニマイザー ρ_α を持つ. $\rho_\alpha(x)$ は $|x|$ の関数.

(2) ミニマイザー ρ_α は以下のオイラーラグランジュ方程式と不等式を満たす.

$$\rho_\alpha(x)^{\frac{2}{3}} = \frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|} - \int_{\mathbb{R}^3}\rho_\alpha(y)\frac{e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dy \qquad (\forall x\in\mathbb{R}^3\setminus\{0\}),\ \ Z\geq\int_{\mathbb{R}^3}\rho_\alpha(x)dx.$$

(3) $\rho_\alpha(x)\in C^\infty(\mathbb{R}^3\setminus\{0\})$.

(4) $\rho_\alpha(x)>0 \quad (\forall x\in\mathbb{R}^3\setminus\{0\})$. また, $t\leq 1$ として $|x|^{\frac{3}{2}t}\rho_\alpha(x)$ は $|x|$ について狭義減少, 狭義凸関数となる.

定理 2　$\alpha>0$ を固定し, $E_\alpha(\lambda) := \inf\{\mathscr{E}_\alpha(\rho)|\rho\in\mathscr{T}, ||\rho||_{L^1(\mathbb{R}^3)}=\lambda\geq 0\}$ について. $\lambda_\alpha := \int_{\mathbb{R}^3}\rho_\alpha(x)dx$ として次が成り立つ.

(1) $\lambda>\lambda_\alpha$ では, $E_\alpha(\lambda)$ は, ミニマイザーを持たない. さらに $E_\alpha(\lambda)=E_\alpha$ は一定値.

(2) $\lambda\leq\lambda_\alpha$ では, $E_\alpha(\lambda)$ はただ 1 つのミニマイザーを持つ. さらに λ について狭義減少狭義凸関数.

(3) $E_\alpha(\lambda)$ は λ について $0\leq\lambda$ で連続, $0<\lambda$ で C^1 級関数で $\lim_{\lambda\downarrow 0}\frac{dE_\alpha(\lambda)}{d\lambda}=-\infty$. さらに $0<\lambda\leq\lambda_\alpha$ で $E_\alpha(\lambda)$ のミニマイザーを $\rho_{\alpha,\lambda}$ とすれば以下が成り立つ. $\epsilon_{\alpha F}(\lambda)$ は物理的にはフェルミエネルギーである.

$$\frac{dE_\alpha(\lambda)}{d\lambda} = \epsilon_{\alpha F}(\lambda),\ 但し\ \epsilon_{\alpha F}(\lambda) := \frac{1}{\lambda}\int_{\mathbb{R}^3}\rho_{\alpha,\lambda}(x)\Big(\rho_{\alpha,\lambda}^{\frac{2}{3}}(x) - \frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|} + \int_{\mathbb{R}^3}\frac{\rho_{\alpha,\lambda}(y)e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dy\Big)dx.$$

注意 1. 定理 1, 定理 2 は $\alpha=0$ の TF 模型でも成り立ち, TF 模型では $\lambda_0=Z$ であることが知られている [1]. これより TF 模型の持つ重要な性質は YTF 模型も持っていることがわかる.

さらに $\rho_\alpha,\ \lambda_\alpha,\ E_\alpha$ などの各種の量のパラメータ α に関する連続性, 単調性, および $\alpha\to 0$ および $\alpha\to\infty$ における詳細な漸近公式を得ることができた.

命題 A　各点 $x\in\mathbb{R}^3\setminus\{0\}$ での電子密度 $\rho_\alpha(x)$, 電子総量 λ_α, エネルギーの大きさ $-E_\alpha$ について, 次が成り立つ.

(1) これら 3 つの量はすべて $0 \le \alpha$ で α について狭義単調減少であり, $\alpha \to \infty$ で 0 に収束する. 電子総量 λ_α を除く 2 つの量は $0 \le \alpha$ で α について C^1 級である. 電子総量 λ_α は $0 \le \alpha$ で α について連続であり, $0 < \alpha$ で α について C^1 級である.

(2) $-E_\alpha$ は $0 \le \alpha$ で α について狭義凸関数.

定理 3 $\alpha \to 0$ での漸近挙動について, 以下が成り立つ. 但し C_1, C_2, C_3 は次で定まる正定数で, ρ_0 は *TF* 模型のミニマイザーである.

$$C_1 := \int_{\mathbb{R}^3} |x|\rho_0(x)dx,\ C_2 := \int_{\mathbb{R}^3} \rho_0^{\frac{2}{3}}(x)dx,\ C_3 := Z\int_{\mathbb{R}^3} |x|\rho_0(x)dx - \frac{1}{2}\int_{(\mathbb{R}^3)^2} |x-y|\rho_0(x)\rho_0(y)dxdy.$$

$$\begin{aligned}
\rho_0(x) > \rho_\alpha(x) &> \rho_0(x) - \frac{3}{4}C_1\rho_0(x)^{\frac{1}{3}}\alpha^2 \quad (x \in \mathbb{R}^3\backslash\{0\}),\\
\lambda_\alpha &= Z - \frac{1}{4\pi}C_2\alpha^2 + o(\alpha^2),\\
E_\alpha &= E_0 + \frac{1}{2}Z^2\alpha - \frac{1}{2}C_3\alpha^2 + o(\alpha^2).
\end{aligned}$$

注意 2. $E_0 < 0,\ \rho_0(x) \le \min\{Z^{\frac{3}{2}}/|x|^{\frac{3}{2}}, 27/(\pi^2|x|^6)\} =: m(x)$ であり, $Z = 1$ のときの E_0 と $\rho_0(x)$ をそれぞれ $\tilde{E}_0$ と $\tilde{\rho}_0(x)$ とすると $E_0 = Z^{\frac{7}{3}}\tilde{E}_0, \rho_0(x) = Z^2\tilde{\rho}_0(Z^{\frac{1}{3}}x)$ であることが知られている [1]. 本論文中で $\rho_\alpha(x) \le m(x),\ \alpha > 0$ も示した.

定理 4 $\alpha \to \infty$ での漸近挙動について, 以下が成り立つ. 但し C_4, C_5, C_6 は次で定まる正定数.

$$C_4 := \int_{\mathbb{R}^3} \frac{e^{-\frac{3}{2}|x|}\sinh(|x|)}{|x|^{\frac{5}{2}}}dx,\ C_5 := \frac{2}{5}\int_{\mathbb{R}^3} \frac{e^{-\frac{5}{2}|x|}}{|x|^{\frac{5}{2}}}dx,\ C_6 := \frac{1}{2}\int_{(\mathbb{R}^3)^2} \frac{e^{-\frac{3}{2}|x|}e^{-\frac{3}{2}|y|}e^{-|x-y|}}{|x|^{\frac{3}{2}}|y|^{\frac{3}{2}}|x-y|}dxdy.$$

$$\begin{aligned}
(\frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|})^{\frac{3}{2}} > \rho_\alpha(x) &> (\frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|})^{\frac{3}{2}}(1 - \frac{Z^{\frac{1}{2}}C_4}{\alpha^{\frac{3}{2}}})^{\frac{3}{2}} \quad (x \in \mathbb{R}^3\backslash\{0\}),\\
2(\frac{2\pi Z}{3\alpha})^{\frac{3}{2}} > \lambda_\alpha &> 2(\frac{2\pi Z}{3\alpha})^{\frac{3}{2}}(1 - \frac{Z^{\frac{1}{2}}C_4}{\alpha^{\frac{3}{2}}})^{\frac{3}{2}},
\end{aligned}$$

$$E_\alpha = -\frac{C_5Z^{\frac{5}{2}}}{\alpha^{\frac{1}{2}}} + O(\frac{1}{\alpha^2}), \qquad \mathscr{E}_{\alpha,K}(\rho_\alpha) = \frac{3}{2}\frac{C_5Z^{\frac{5}{2}}}{\alpha^{\frac{1}{2}}} + O(\frac{1}{\alpha^2}),$$

$$\mathscr{E}_{\alpha,A}(\rho_\alpha) = -\frac{5}{2}\frac{C_5Z^{\frac{5}{2}}}{\alpha^{\frac{1}{2}}} + O(\frac{1}{\alpha^2}), \qquad D_\alpha(\rho_\alpha,\rho_\alpha) = \frac{C_6Z^3}{2\alpha^2} + O(\frac{1}{\alpha^{\frac{7}{2}}}).$$

注意 3. 証明に際し TF 模型で証明に使った道具を YTF 模型用に新たに作った. 例えばクーロン力でのニュートンの定理に対し湯川相互作用でのニュートンの定理を新たに作った. すなわち球対称関数 $\rho(x) \in L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3)$ に対し

クーロン力のニュートン定理　　　　　　　　湯川型のニュートン定理

$$\int_{\mathbb{R}^3} \frac{\rho(y)dy}{|x-y|} = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\rho(y)dy}{\max\{|x|,|y|\}} \quad \text{に対応し} \quad \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\rho(y)e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dy = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\rho(y)dy}{\alpha|x||y|\max\{\frac{e^{\alpha|x|}}{\sinh(\alpha|y|)}, \frac{e^{\alpha|y|}}{\sinh(\alpha|x|)}\}}\text{を使った.}$$

注意 4. YTF 模型については今まで考察されてこなかったと思われるが, この 4 つの定理からわかるように, YTF 模型は TF 模型に似た性質を持ち, $\alpha \to 0$ でなめらかに単調に TF 模型に近づくことがわかった. $\alpha \to \infty$ では $D_\alpha(\rho_\alpha, \rho_\alpha)$ の挙動でわかるように電子間斥力エネルギーの影響が小さくなり, ミニマイザーは運動エネルギーと引力エネルギーだけからなるエネルギー汎関数の定める解 $\rho(x) := (\frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|})^{\frac{3}{2}}$ に近づくこともわかった.

参考文献

[1] E. H. Lieb and B. Simon, The Thomas-Fermi theory of atoms, molecules and solids, Advance in Math. , 23(1977)pp. 22-116.

[2] 中嶋貞雄, 超伝導入門, 培風館 (1971)10 ページ.

湯川型 Thomas-Fermi 模型および関連模型の数学解析

首都大学東京 数理科学専攻 修士 2 年
18843423 山口浩人

2020 年 1 月 10 日

目次

1 はじめに

Thomas-Fermi 模型 (以下 TF 模型と呼ぶ) は, 原子番号の大きい原子の電子全体の粒子密度 $\rho(x)$ についての近似的な理論である. 非線形とはなるが, 電子の数だけ関数を持つハートレーフォック近似に比べればたった 1 つの関数 ρ の単純な (すっきりとした) 模型である. TF 模型についての数学的に厳密な詳細, 広範な考察は, すでに Lieb と Simon による ([6]) にある. その後 TF 模型の研究は, Thomas-Fermi-von Weizs*ä*cker 模型 ([1]), Thomas-Fermi-Dirac-von Weizs*ä*cker 模型 ([7][11]) へと進展している.

本稿はこの流れとは別の角度で TF 模型を拡張するものであり, 主に湯川型 Thomas-Fermi 模型 (以下 YTF 模型と呼ぶ) を考察の対象としている. TF 模型では, エネルギー汎関数での粒子間の相互作用項はクーロン相互作用としている. それに対し YTF 模型は, 粒子間の相互作用を湯川相互作用とした TF 模型である.

湯川相互作用について少し述べる. 静電気力は, 粒子間の距離を r として $\frac{1}{r}$ に比例するクーロンポテンシャルで表現され, 遠距離力と言われる. これに対し湯川相互作用は, 粒子間距離 r, 正定数 α として $\frac{e^{-\alpha r}}{r}$ に比例する湯川ポテンシャルで表現される. (定数 $\alpha = 0$ としたときが TF 模型である.) 物理的にこのような設定が適切となる状況があるかどうかは断定できないが, 例えば金属結晶内の正イオン・伝導電子間の引力や伝導電子間の斥力が湯川型相互作用で近似できることはよく知られている ([9, 10 ページ]). 結晶内では, 主に電子による遮蔽効果でクーロンポテンシャルは湯川ポテンシャルに置き換わるのである.

本稿では YTF 模型について 5 つの定理を得た. 定理 2.1 と定理 2.2 は, YTF 模型は TF 模型の基本的な性質を全て持っているということを意味する定理である. 定理 2.3 は $\alpha \to 0$, つまり YTF 模型を TF 模型に近づけていくときの基本的な量の漸近挙動に関するものである. 定理 2.4 は $\alpha \to \infty$, つまり YTF 模型を TF 模型から遠ざけどんどん近距離力にしていくときの基本的な量の漸

近挙動に関するものである. 定理 2.5 は α を変化させたときの基本的な量の変化の単調性, なめらかさ, 凸性などに関するものである. YTF 模型については今まで考察されてこなかったように思われる. この 5 つの定理は新しく得られたものと思われる. この 5 つの定理に至る方法は ([6]) によるところが大きい.

YTF 模型に関連する模型としてもう 1 つの模型 (以下 BTF 模型と呼ぶ) も考察した. これはもっと単純なもので, TF 模型のエネルギー汎関数を変えずに単に電子の存在する関数空間を原点にある原子核を中心とする半径 R の開球 $B(R)$ に限定しただけの模型である. ある意味 $\frac{1}{\alpha}$ という長さのパラメータに対応させて R というパラメータを TF 模型に導入し拡張した模型と考えられる.

BTF 模型についても 5 つの定理を得た. 定理 3.1, 定理 3.2, 定理 3.4 については, 対応する YTF 模型の定理 2.1, 定理 2.2, 定理 2.4 と同等の結果が得られたが, 定理 3.3, 定理 3.5 については対応する YTF 模型の定理 2.3, 定理 2.5 ほど詳しい結果は得られなかった.

2 YTF 模型の問題設定と主な定理

2.1 YTF 模型の問題設定

以下に YTF 模型の電子全体の粒子密度 $\rho(x)$ についてのエネルギー汎関数 $\mathscr{E}_\alpha(\rho)$ を与える. エネルギー汎関数 $\mathscr{E}_\alpha(\rho)$ は 3 つの積分項 $\mathscr{E}_{\alpha,\,K}(\rho)$, $\mathscr{E}_{\alpha,\,A}(\rho)$, $D_\alpha(\rho,\,\rho)$ からなり, それぞれ運動エネルギー項, 原子核・電子間引力湯川ポテンシャルエネルギー項, 電子間斥力湯川ポテンシャルエネルギー項である. 電子の総量 $\int_{\mathbb{R}^3}\rho(x)dx$ は連続量と考える. $\alpha = 0$ とすれば TF 模型エネルギー汎関数 $\mathscr{E}_0(\rho)$ となる.

関数空間 $\mathscr{T} := \{\rho \in L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3) | \rho \geq 0\}$ 上の関数 ρ に対して, エネルギー汎関数 $\mathscr{E}_\alpha(\rho)$ を次で定める.

$$\mathscr{E}_\alpha(\rho) := \frac{3}{5}\int_{\mathbb{R}^3}\rho(x)^{\frac{5}{3}}dx - \int_{\mathbb{R}^3}\rho(x)\frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|}dx + \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3}\rho(x)\rho(y)\frac{e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dxdy.$$

ここで Z, α は正の定数である. 物理的には Z は原子番号であり, $\frac{1}{\alpha}$ は力の到達距離の目安となる. また以下を定める.

$$\mathscr{E}_{\alpha,\,K}(\rho) := \frac{3}{5}\int_{\mathbb{R}^3}\rho(x)^{\frac{5}{3}}dx, \qquad \mathscr{E}_{\alpha,\,A}(\rho) := -\int_{\mathbb{R}^3}\rho(x)\frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|}dx,$$

$$D_\alpha(f,\,g) := \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3}f(x)g(y)\frac{e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dxdy.$$

ここでは,

$$\mathscr{T} := \{\rho \in L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3) | \rho \geq 0\},$$

として次の最小化問題を考える.

$$E_\alpha := \inf\{\mathscr{E}_\alpha(\rho) | \rho \in \mathscr{T}\}.$$

また,

$$\mathscr{T}_\lambda := \{\rho \in \mathscr{T} \mid ||\rho||_1 \leq \lambda\}, \qquad \mathscr{T}_{\partial\lambda} := \{\rho \in \mathscr{T} \mid ||\rho||_1 = \lambda\},$$

として, 次の最小化問題も考える.

$$E_{\alpha\leq}(\lambda) := \inf\{\mathscr{E}_\alpha(\rho)|\rho \in \mathscr{T}_\lambda\}, \qquad E_\alpha(\lambda) := \inf\{\mathscr{E}_\alpha(\rho)|\rho \in \mathscr{T}_{\partial\lambda}\}.$$

$\alpha = 0$ の YTF 模型が通常の TF 模型であり, この場合は

$$\mathscr{T}_{TF} := \{\rho \in L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3) \cap L^1(\mathbb{R}^3)|\rho \geq 0\},$$
$$\mathscr{T}_\lambda := \{\rho \in \mathscr{T} \mid ||\rho||_1 \leq \lambda\}, \qquad \mathscr{T}_{\partial\lambda} := \{\rho \in \mathscr{T} \mid ||\rho||_1 = \lambda\},$$

として,

$$E_{TF} := \inf\{\mathscr{E}_0(\rho)|\rho \in \mathscr{T}_0\},$$
$$E_{TF,\,\leq}(\lambda) := \inf\{\mathscr{E}_0(\rho)|\rho \in \mathscr{T}_\lambda\}, \qquad E_{TF}(\lambda) := \inf\{\mathscr{E}_\alpha(\rho)|\rho \in \mathscr{T}_{\partial\lambda}\},$$

という最小化問題を考える. これについてはすでに Lieb と Simin による参考文献 ([6]) にある.

以後積分領域は $\mathbb{R}^3$ や $\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3$ の場合 $\int$ の記号に対して省略する場合もある.

2.2 YTF 模型の主な定理

定理 2.1 $\alpha > 0$ を固定したとき次が成り立つ.

(1) E_α はただ 1 つのミニマイザー ρ_α を持つ. $\rho_\alpha(x)$ は球対称関数.

(2) ミニマイザー ρ_α は以下のオイラーラグランジュ方程式を満たす.

$$\rho_\alpha(x)^{\frac{2}{3}} = \frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|} - \int \rho_\alpha(y)\frac{e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dy =: V_\alpha(x) \qquad (\forall x \in \mathbb{R}^3 \setminus \{0\}).$$

またこれより,

$$Z \geq \int \rho_\alpha(x)dx.$$

(3) $V_\alpha(x),\ \rho_\alpha(x) \in C^\infty(\mathbb{R}^3 \setminus \{0\})$.

(4) $V_\alpha(x) > 0$ かつ $\rho_\alpha(x) > 0$ $(\forall x \in \mathbb{R}^3 \setminus \{0\})$. また, $t \leq 1$ として $|x|^t V_\alpha(x),\ |x|^{\frac{3}{2}t}\rho_\alpha(x)$ は $|x|$ について狭義減少, 狭義凸関数となる.

定理 2.2 $\alpha > 0$ を固定し, $E_\alpha(\lambda) := \inf\{\mathscr{E}_\alpha(\rho)|\rho \in \mathscr{T},\ ||\rho||_1 = \lambda\}$ について, $\lambda_\alpha := \int \rho_\alpha dx$ として次が成り立つ.

(1) $\lambda > \lambda_\alpha$ では, $E_\alpha(\lambda)$ は, ミニマイザーを持たない. さらに $E_\alpha(\lambda) = E_\alpha$ は一定値.

(2) $\lambda \leq \lambda_\alpha$ では, $E_\alpha(\lambda)$ はただ 1 つのミニマイザーを持つ. さらに λ について狭義減少狭義凸関数.

(3) $E_\alpha(\lambda)$ は λ について $0 \le \lambda < \infty$ で連続, $0 < \lambda < \infty$ で C^1 級関数で $\lim_{\lambda\downarrow 0}\frac{dE_\alpha(\lambda)}{d\lambda} = -\infty$. さらに $\lambda > 0$ で $E_\alpha(\lambda)$ がミニマイザー $\rho_{\alpha,\,\lambda}$ を持つとき

$$\frac{dE_\alpha(\lambda)}{d\lambda} = \epsilon_{\alpha F}(\lambda).$$

但し

$$\epsilon_{\alpha F}(\lambda) = \frac{1}{\lambda}\int \rho_{\alpha,\,\lambda}(x)(\rho_{\alpha,\,\lambda}^{\frac{2}{3}}(x) - \frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|} + \int \frac{\rho_{\alpha,\,\lambda}(y)e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dy)dx.$$

注意. 定理 2.1, 定理 2.2 は $\alpha = 0$ の TF 模型で成り立つ. これはすでに Lieb と Simon による ([6]) にある.

以下の定理の証明にも必要な, $\rho_\alpha(x)$ の一様減衰評価および, ρ_α, λ_α, E_α の α に関する連続性, 単調性に関する命題が成り立つが, これらについては, Section7 でまとめて扱うこととする. それらをもとに, $\alpha \to 0$ および $\alpha \to \infty$ における種々の量の漸近挙動に関して次を得る.

定理 2.3 *$\alpha \to 0$ での漸近挙動に対し, 以下が成り立つ. 但し C_1, C_2, C_3 は次で定まる正値定数で, ρ_0 は TF 模型のミニマイザーである.*

$$\begin{aligned} C_1 &:= \int |x|\rho_0(x)dx,\ C_2 := \int \rho_0^{\frac{2}{3}}dx, \\ C_3 &:= Z\int |x|\rho_0(x)dx - \frac{1}{2}\int |x-y|\rho_0(x)\rho_0(y)dxdy. \end{aligned}$$

(1)

$$C_2 < \infty \text{ かつ } \lambda_\alpha = Z - \frac{1}{4\pi}C_2\alpha^2 + o(\alpha^2).$$

(2)

$$\begin{aligned} C_3 > 0 \text{ かつ } E_\alpha &= E_0 + \frac{1}{2}Z^2\alpha - \frac{1}{2}C_3\alpha^2 + o(\alpha^2). \\ \mathscr{E}_{\alpha,\,K}(\rho_\alpha) &= -E_0 - \frac{1}{2}C_3\alpha^2 + o(\alpha^2), \quad (1) \\ \mathscr{E}_{\alpha,\,A}(\rho_\alpha) &= \frac{7}{3}E_0 + Z^2\alpha - \frac{5}{6}C_3\alpha^2 + o(\alpha^2), \quad (2) \\ D_\alpha(\rho_\alpha,\,\rho_\alpha) &= -\frac{1}{3}E_0 - \frac{1}{2}Z^2\alpha + \frac{5}{6}C_3\alpha^2 + o(\alpha^2). \quad (3) \end{aligned}$$

(3)

$$\begin{aligned} C_1 < \infty \text{ かつ } \quad & \rho_0(x) > \rho_\alpha(x) > \rho_0(x) - \frac{3}{4}C_1\rho_0(x)^{\frac{1}{3}}\alpha^2\ (x \in \mathbb{R}^3\backslash\{0\}), \\ & 0 > \frac{\partial\rho_\alpha}{\partial\alpha}(x) > -\frac{3}{2}C_1\rho_0(x)^{\frac{1}{3}}\alpha\ (x \in \mathbb{R}^3\backslash\{0\}), \\ & \lim_{\alpha\to 0}\frac{\partial\rho_\alpha}{\partial\alpha}(x) = \frac{\partial\rho_\alpha}{\partial\alpha}|_{\alpha=0}(x) = 0\ (x \in \mathbb{R}^3\backslash\{0\}). \end{aligned}$$

注意. $E_0 < 0$, $\rho_0(x) \le \min\{Z^{\frac{3}{2}}/|x|^{\frac{3}{2}},\ 27/\pi^2|x|^6\} =: m(x)$ であり, $Z = 1$ のときの E_0 と $\rho_0(x)$ をそれぞれ $\tilde{E}_0$ と $\tilde{\rho}_0(x)$ とすると $E_0 = Z^{\frac{7}{3}}\tilde{E}_0$, $\rho_0(x) = Z^2\tilde{\rho}_0(Z^{\frac{1}{3}}x)$ であることが知られている ([6]). また命題 7.1 で, $\rho_\alpha(x)$ の α に関する一様評価として $\rho_\alpha \le m(x)$, $\alpha > 0$ も示した.

定理 2.4 $\alpha \to \infty$ での漸近挙動に対し, 以下が成り立つ. 但し $C_4,\ C_5,\ C_6$ は次で定まる正値定数

$$
\begin{aligned}
C_4 &:= \int \frac{e^{-\frac{3}{2}|x|}\sinh(|x|)}{|x|^{\frac{5}{2}}}dx,\ C_5 := \frac{2}{5}\int \frac{e^{-\frac{5}{2}|x|}}{|x|^{\frac{5}{2}}}dx,\\
C_6 &:= \frac{1}{2}\int \frac{e^{-\frac{3}{2}|x|}e^{-\frac{3}{2}|y|}e^{-|x-y|}}{|x|^{\frac{3}{2}}|y|^{\frac{3}{2}}|x-y|}dxdy,
\end{aligned}
$$

(1)

$$
\Big(\frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|}\Big)^{\frac{3}{2}} > \rho_\alpha(x) > \Big(\frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|}\Big)^{\frac{3}{2}}\Big(1 - \frac{Z^{\frac{1}{2}}C_4}{\alpha^{\frac{3}{2}}}\Big)^{\frac{3}{2}} \ \text{ in } \ \mathbb{R}^3 \setminus \{0\}.
$$

(2)

$$
2\Big(\frac{2\pi Z}{3\alpha}\Big)^{\frac{3}{2}} > \lambda_\alpha > 2\Big(\frac{2\pi Z}{3\alpha}\Big)^{\frac{3}{2}}\Big(1 - \frac{Z^{\frac{1}{2}}C_4}{\alpha^{\frac{3}{2}}}\Big)^{\frac{3}{2}}.
$$

(3)

$$
\begin{aligned}
E_\alpha &= -\frac{C_5Z^{\frac{5}{2}}}{\alpha^{\frac{1}{2}}} + O\Big(\frac{1}{\alpha^2}\Big),\\
\mathscr{E}_{\alpha,\,K}(\rho_\alpha) &= \frac{3}{2}\frac{C_5Z^{\frac{5}{2}}}{\alpha^{\frac{1}{2}}} + O\Big(\frac{1}{\alpha^2}\Big),\\
\mathscr{E}_{\alpha,\,A}(\rho_\alpha) &= -\frac{5}{2}\frac{C_5Z^{\frac{5}{2}}}{\alpha^{\frac{1}{2}}} + O\Big(\frac{1}{\alpha^2}\Big),\\
D_\alpha(\rho_\alpha,\ \rho_\alpha) &= \frac{C_6Z^3}{2\alpha^2} + O\Big(\frac{1}{\alpha^{\frac{7}{2}}}\Big),\\
\frac{dE_\alpha}{d\alpha} &= \frac{1}{2}\frac{C_5Z^{\frac{5}{2}}}{\alpha^{\frac{3}{2}}} + O\Big(\frac{1}{\alpha^3}\Big).
\end{aligned}
$$

注意. $\alpha \to \infty$ では $D_\alpha(\rho_\alpha, \rho_\alpha)$ の挙動でわかるように電子間斥力エネルギーの影響が小さくなり, ミニマイザーは運動エネルギーと引力エネルギーだけからなるエネルギー汎関数の定める解 $\rho(x) := (\frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|})^{\frac{3}{2}}$ に近づくことがわかる.

Section7 で考察する種々の重要な命題を合わせることで, 総合的にまとめて以下の主張を得ることができる.

定理 2.5 各点 $x \in \mathbb{R}^3\backslash\{0\}$ での電子密度 $\rho_\alpha(x)$, 電子総量 λ_α, エネルギーの大きさ $-E_\alpha$, 運動エネルギー $\mathscr{E}_{\alpha,\,K}$, 引力エネルギーの大きさ $-\mathscr{E}_{\alpha,\,A}$, 斥力エネルギー $D_\alpha(\rho_\alpha,\ \rho_\alpha)$ について,

(1) これら *6* つの量はすべて $0 \le \alpha$ で α について狭義単調減少であり, $\alpha \to \infty$ で 0 に収束する. 電子総量 λ_α を除く *5* つの量は $0 \le \alpha$ で α について C^1 級である. 電子総量 λ_α は $0 \le \alpha$ で α について連続であり, $0 < \alpha$ で α について C^1 級である.

(2) $-E_\alpha$ は $0 \le \alpha$ で α について狭義凸関数. $-\mathscr{E}_{\alpha,\,A}$ と $D_\alpha(\rho_\alpha,\ \rho_\alpha)$ は $\alpha \to 0$ でも $\alpha \to \infty$ でも α について狭義凸な関数に漸近していく. λ_α と $\mathscr{E}_{\alpha,\,K}$ は $\alpha \to 0$ では α について狭義凹な関数に漸近していき, $\alpha \to \infty$ では α について狭義凸な関数に漸近していく.

(3) エネルギー比は

$$-E_\alpha : \mathscr{E}_{\alpha,\,K} : -\mathscr{E}_{\alpha,\,A} : D_\alpha(\rho_\alpha,\ \rho_\alpha) \to 1 : 1 : \frac{7}{3} : \frac{1}{3}\ (\alpha \to 0)$$
$$-E_\alpha : \mathscr{E}_{\alpha,\,K} : -\mathscr{E}_{\alpha,\,A} : D_\alpha(\rho_\alpha,\ \rho_\alpha) \to 1 : \frac{3}{2} : \frac{5}{2} : 0\ (\alpha \to \infty)$$

3 BTF 模型の問題設定と主な定理

3.1 BTF 模型の問題設定

電子全体の密度関数を $\rho(x)$ とし, 電子の総量 $\int_{\mathbb{R}^3} \rho(x)dx$ は連続量と考える. 原点中心半径 R の開球 $B(R)$ 内にしか電子全体は存在しないという BTF 模型の条件は考える関数空間 $\mathscr{T}_R$ の条件として以下のように表現される. この空間が通常の TF 模型の空間 $\mathscr{T}_{TF}$ に入っていることに注意する.

$$\begin{aligned} &\mathscr{T}_R := \{\rho \in L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3) | \rho \ge 0,\ |x| \ge R\ \text{で} \rho(x) = 0\}, \qquad (4)\\ &\subset \mathscr{T}_{TF} := \{\rho \in L^1(\mathbb{R}^3) \cap L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3) | \rho \ge 0\}. \end{aligned}$$

電子全体の粒子密度 $\rho(x)$ についてのエネルギー汎関数 $\mathscr{E}(\rho)$ は通常の TF 模型と同じく以下の (5) で与える. 注意するのは, 関数空間 $\mathscr{T}_R$ では, 開球 $B(R)$ の外では $\rho(x) = 0$ であり, 距離 $|x-y|$ が $2R$ 以上になると $\rho(x),\ \rho(y)$ のどちらかは 0 になるので, エネルギー汎関数は (6) のように書いてもおなじということである. ここで $\chi_{B(R)}(x)$ は, $|x| < R$ で値 1, $|x| \ge R$ で値 0 をとる特性関数である. さらに (7) のように積分領域を $B(R),\ B(R)^2$ と考えても同じである.

$$\begin{aligned} \mathscr{E}(\rho) : &= \frac{3}{5}\int_{\mathbb{R}^3} \rho(x)^{\frac{5}{3}}dx - \int_{\mathbb{R}^3} \frac{Z\rho(x)}{|x|}dx + \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \frac{\rho(x)\rho(y)}{|x-y|}dxdy, \qquad (5)\\ &= \frac{3}{5}\int_{\mathbb{R}^3} \rho(x)^{\frac{5}{3}}dx - \int_{\mathbb{R}^3} \rho(x)\frac{Z\chi_{B(R)}(x)}{|x|}dx\\ &\qquad + \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \rho(x)\rho(y)\frac{\chi_{B(2R)}(x-y)}{|x-y|}dxdy, \qquad (6)\\ &= \frac{3}{5}\int_{B(R)} \rho(x)^{\frac{5}{3}}dx - \int_{B(R)} \frac{Z\rho(x)}{|x|}dx + \frac{1}{2}\int_{B(R)^2} \frac{\rho(x)\rho(y)}{|x-y|}dxdy \qquad (7) \end{aligned}$$

ここで Z は正の定数. また以下を定める.

$$\mathscr{E}_K(\rho) := \frac{3}{5}\int_{\mathbb{R}^3} \rho(x)^{\frac{5}{3}} dx, \qquad \mathscr{E}_A(\rho) := -\int_{\mathbb{R}^3} \frac{Z\rho(x)}{|x|} dx,$$
$$D(f,\ g) := \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \frac{f(x)g(y)}{|x-y|} dxdy.$$

エネルギー汎関数 $\mathscr{E}(\rho)$ は 3 つの積分項 $\mathscr{E}_K(\rho),\ \mathscr{E}_A(\rho),\ D(\rho,\ \rho)$ からなり, それぞれ運動エネルギー項, 原子核・電子間引力ポテンシャルエネルギー項, 電子間斥力ポテンシャルエネルギー項である.

ここでは,

$$\mathscr{T}_R := \{\rho \in L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3) | \rho \geq 0,\ |x| \geq R \text{ で} \rho(x) = 0\},$$

として次の最小化問題を考える.

$$E_R := \inf\{\mathscr{E}(\rho) | \rho \in \mathscr{T}_R\}.$$

また,

$$\mathscr{T}_{R,\ \lambda} := \{\rho \in \mathscr{T}_R \mid ||\rho||_1 \leq \lambda\}, \qquad \mathscr{T}_{R,\ \partial\lambda} := \{\rho \in \mathscr{T}_R \mid ||\rho||_1 = \lambda\},$$

として, 次の最小化問題も考える.

$$E_{R\leq}(\lambda) := \inf\{\mathscr{E}(\rho) | \rho \in \mathscr{T}_{R,\ \lambda}\}, \qquad E_R(\lambda) := \inf\{\mathscr{E}(\rho) | \rho \in \mathscr{T}_{R,.\ \partial\lambda}\}.$$

以後, 積分領域は $\mathbb{R}^3,\ B(R)$ のどちらでもよい場合や $\mathbb{R}^{3\times 2},\ B(R)^2$ のどちらでもよい場合省略する.

3.2 BTF 模型の主な定理

定理 3.1 $R > 0$ を固定したとき次が成り立つ.

(1) E_R はただ 1 つのミニマイザー ρ_R を持つ. $\rho_R(x)$ は $|x|$ の関数.

(2)

$$Z \geq \int_{B(R)} \rho_R dx.$$

ミニマイザー ρ_R は $B(R)\setminus\{0\}$ で以下のオイラーラグランジュ方程式を満たす.

$$\rho_R(x)^{\frac{2}{3}} = \frac{Z}{|x|} - \int_{B(R)} \frac{\rho_R(y)}{|x-y|} dy =: V_R(x) \qquad (\forall x \in B(R) \setminus \{0\}).$$

注意. $B(R)$ の外では $\rho_R(x) = 0$ だが $V_R(x) \geq 0$ で関係はない.

(3) $V_R(x),\ \rho_R(x) \in C^\infty(B(R) \setminus \{0\})$.

(4) $V_R(x) > 0$ かつ $\rho_R(x) > 0 \quad (\forall x \in B(R) \setminus \{0\})$. また, $t \leq 1$ として $0 < |x| < R$ で $|x|^t V_R(x),\ |x|^{\frac{3}{2}t}\rho_R(x)$ は $|x|$ について狭義減少, 狭義凸関数となる.

定理 3.2 $R > 0$ を固定し，$E_R(\lambda) := \inf\{\mathscr{E}(\rho) | \rho \in \mathscr{T}_{R,\,\partial\lambda}\}$ について．

$\lambda_R := \int \rho_R dx$ として次が成り立つ．

(1) 任意の $\lambda \geq 0$ で，$E_R(\lambda)$ は, ただ 1 つのミニマイザー $\rho_{R,\,\lambda}$ を持つ． $\rho_{R,\,\lambda}(x)$ は $|x|$ の関数.

(2) 任意の $\lambda \geq 0$ で，$E_R(\lambda)$ は狭義凸関数. $\lambda \leq \lambda_R$ で狭義減少関数, $\lambda \geq \lambda_R$ で狭義増加関数

(3) $E_R(\lambda)$ は λ について $0 \leq \lambda < \infty$ で連続, $0 < \lambda < \infty$ で C^1 級関数で $\lim_{\lambda \downarrow 0} \frac{dE_R(\lambda)}{d\lambda} = -\infty$. さらに $E_R(\lambda)$ のミニマイザーを $\rho_{R,\,\lambda}$ として, $\lambda > 0$ で,

$$\frac{dE_R(\lambda)}{d\lambda} = \epsilon_{RF}(\lambda).$$

但し

$$\epsilon_{RF}(\lambda) := \frac{1}{\lambda} \int_{B(R)} \rho_{R,\,\lambda}(x) (\rho_{R,\,\lambda}^{\frac{2}{3}} - \frac{Z}{|x|} + \int_{B(R)} \frac{\rho_{R,\,\lambda}(y)}{|x-y|} dy) dx.$$

以下の定理の証明にも必要な, ρ_R, λ_R, E_R の R に関する連続性, 単調性に関する命題が成り立つが, これらについては, Section13 でまとめて扱うこととする. それらをもとに, 種々の量の $R \to \infty$ における連続性および $R \to 0$ における漸近挙動に関して次を得る.

定理 3.3 通常の *TF* 模型のエネルギーの下限を E_{TF}, そのときのミニマイザーを ρ_{TF} とし, そのときの全電子量は Z と知られているが.

(1) $R \to \infty$ で, $E_R \to E_{TF}$.

(2) $R \to \infty$ で, $\rho_R(x) \to \rho_{TF}(x)$ $(x \in \mathbb{R}^3 \backslash \{0\})$.

(3) $R \to \infty$ で, $\lambda_R \to Z$.

(4) $R \to \infty$ で, $\rho_R \to \rho_{TF}$ in $L^r(\mathbb{R}^3)$ $(1 \leq r \leq \frac{5}{3})$.

定理 3.4 $R \to 0$ での漸近挙動に対し, 以下が成り立つ.

(1)

$$(\frac{Z}{|x|})^{\frac{3}{2}} > \rho_R(x) > (\frac{Z}{|x|})^{\frac{3}{2}} (1 - \frac{8\pi Z^{\frac{1}{2}}}{3} R^{\frac{3}{2}})^{\frac{3}{2}} \quad (x \in B(R) \backslash \{0\}).$$

(2)

$$\frac{8\pi}{3} (ZR)^{\frac{3}{2}} > \lambda_R > \frac{8\pi}{3} (ZR)^{\frac{3}{2}} (1 - \frac{8\pi Z^{\frac{1}{2}}}{3} R^{\frac{3}{2}})^{\frac{3}{2}}.$$

(3)

$$\begin{aligned}
E_R &= -\frac{16\pi Z^{\frac{5}{2}}}{5}R^{\frac{1}{2}} + O(R^2),\\
\mathscr{E}_K(\rho_R) &= \frac{24\pi Z^{\frac{5}{2}}}{5}R^{\frac{1}{2}} + O(R^2),\\
\mathscr{E}_A(\rho_R) &= -8\pi Z^{\frac{5}{2}}R^{\frac{1}{2}} + O(R^2),\\
D(\rho_R,\ \rho_R) &= \frac{52\pi^2}{3}Z^4R^2 + O(R^{\frac{7}{2}}),\\
\frac{dE_R}{dR} &= -\frac{8\pi Z^{\frac{5}{2}}}{5}R^{-\frac{1}{2}} + O(R).
\end{aligned}$$

Section13 で考察する種々の重要な命題を合わせることで, 総合的にまとめて以下の主張を得ることができる.

定理 3.5 *(1)* 各点 $x \in B(R)\backslash\{0\}$ での電子密度 $\rho_R(x)$, 電子総量 λ_R, エネルギーの大きさ $-E_R$ について, 電子総量 λ_R とエネルギーの大きさ $-E_R$ は $0 < R$ で R について狭義単調増加であり, $R \to 0$ で 0 に収束する. エネルギーの大きさ $-E_R$ は $0 < R$ で R について C^1 級であり, 各点 $x \in B(R)\backslash\{0\}$ での電子密度 $\rho_R(x)$ と電子総量 λ_R は $0 < R$ で R について連続である.

(2) エネルギー比は

$$-E_R : \mathscr{E}_{R,\ K} : -\mathscr{E}_{R,\ A} : D(\rho_R,\ \rho_R) \to 1 : \frac{3}{2} : \frac{5}{2} : 0\ (R \to 0).$$

4 準備

あとで使う補題を以下に書くが, 最初は飛ばすかざっと見て必要に応じて戻ってほしい. 補題 4.1 から補題 4.11 までは結果のみ書いた. 次に湯川型ニュートンの定理及び $D_\alpha(f,\ g)$ に関する補題を上げる. 最後に他のあとで使う補題を上げた.

4.1 あとで使う補題 (結果のみ）と湯川型ニュートンの定理

補題 4.1 (合成積のヤングの不等式) *([5, Section4. 2remark(2)]).* $1 \le p,\ q,\ r \le \infty$ として, $f \in L^p(\mathbb{R}^3)$, $g \in L^q(\mathbb{R}^3)$ に対して合成積 $f * g(x) := \int_{\mathbb{R}^3} f(y)g(x-y)dy$ を定義する. このとき $1 + \frac{1}{r} = \frac{1}{p} + \frac{1}{q}$ として次の不等式が成立する.

$$||f * g||_{L^r} \le ||f||_{L^p}||g||_{L^q}.$$

補題 4.2 (共役関数の合成積の連続性と遠方での 0 への収束) *([5, Section2. 20]).* $1 < p,\ q < \infty$, $1 = \frac{1}{p} + \frac{1}{q}$ として, $f \in L^p(\mathbb{R}^3)$, $g \in L^q(\mathbb{R}^3)$ に対して合成積 $f * g(x) := \int_{\mathbb{R}^3} f(y)g(x-y)dy$ は $\mathbb{R}^3$ で連続関数である. また $|x| \to \infty$ で $f * g(x) \to 0$.

補題 4.3 (弱最大値原理) *([5, Section9. 3, 9. 4]).* U を有界開集合, $f \in C(\bar{U})$, $-\Delta f \le 0$ in $\mathcal{D}'(U)$ とすれば, $\sup_{\bar{U}} f \le \sup_{\partial U} f$.

系 4.4 U を開集合, $f(x) \to 0$ $(|x| \to \infty)$, $f \in C(\bar{U})$, $-\Delta f \le 0$ in $\mathcal{D}'(U)$ ならば, $\sup_{\bar{U}} f \le \sup_{\partial U} f^+$. ただし $f^+(x) = \max\{f(x), 0\}$.

(証明.) $B(R)$ を原点中心半径 R の開球とし, $U_R := U \cap B(R)$ とおくと, $f \le f^+$ なので補題 4.3 より, $\sup_{\bar{U}_R} f \le \max\{\sup_{\partial U} f^+, \sup_{\partial B(R)} f^+\}$. $R \to \infty$ とすれば, $\sup_{\bar{U}} f \le \sup_{\partial U} f^+$.

補題 4.5 (強最大値原理) *([3, Chapter6. 4]).*
U を有界連結開集合, $f \in C^2(U) \cap C(\bar{U})$, $\gamma \in L^\infty(U)$, $\gamma \ge 0$ として $(-\Delta + \gamma) f \le 0$ in U とする. さらに内点 $x_0 \in U$ で, 非負値の最大値 $M = f(x_0)$ をとるなら, $f \equiv M$ in $\bar{U}$.

補題 4.6 (中点的狭義凸関数ならば狭義凸関数) *([12, 2 章 1 節]).*
連続関数 f : 区間 $I \to \mathbb{R}$ について,

$$f(\frac{a+b}{2}) < \frac{1}{2}\{f(a) + f(b)\} \ (\forall a,\ b\ s.\,t.\ a \ne b,\ a,\ b \in I)$$

ならば f は区間 I で狭義凸関数.

補題 4.7 (マツァの定理) *([5, Section2. 13]).*
可測集合 $U \subset \mathbb{R}^3$, $1 \le p \le \infty$ で $\{f_n\}_{n=1}^\infty \subset L^p(U)$, $f \in L^p(U)$ が $f_n \rightharpoonup f$ in $L^p(U)$ と弱収束するならば次が成り立つ.

$\exists \{F_n\}_{n=1}^\infty \subset L^p(U)$, $\exists \{C_{ni} \mid i,\ n \in \mathbb{N},\ 1 \le i \le n,\ C_{ni} \ge 0,\ \Sigma_{i=1}^n C_{ni} = 1\}$ $s.\,t.$
強収束 $F_n \to f$, $F_n = \Sigma_{i=1}^n C_{ni} f_i$.

補題 4.8 (正則性定理 1) *([8, 定理 2. 25]).*
領域 D で $u \in H^1(D)$ が $\forall \phi \in C_c^\infty(D)$ に対し

$$\int_D (\nabla u \cdot \nabla \phi + V u \phi) dx = \int_D f \phi dx$$

を満たし, さらに $V \in L^\infty(D)$, $f \in L^2(D)$ ならば,

$\forall D_1 \Subset \forall D_2 \Subset D$ に対し $\exists C s.\,t.\ ||u||_{H^2(D_1)} \le C(||u||_{L^2(D_2)} + ||f||_{L^2(D_2)})$.

但し領域 A, B に対し $A \Subset B$ とは, $\bar{A}$ がコンパクトかつ $\bar{A} \subset B$ と定義する.

補題 4.9 (正則性定理 2) *([8, 系 2. 27]).*
領域 D で $u \in H^1(D)$ が $\forall \phi \in C_c^\infty(D)$ に対し

$$\int_D (\nabla u \cdot \nabla \phi + V u \phi) dx = \int_D f \phi dx$$

を満たし, さらに V, $f \in C^\infty(D)$ ならば, $u \in C^\infty(D)$ となる.

補題 4.10 ($f^+,\ f^-$ の性質) *([5, Section 6. 18]).*
$f \in H^1$ で $f^+ := \max\{f,\ 0\},\ f^- := \max\{-f,\ 0\}$ に対し以下が成り立つ.

$$f^+,\ f^- \in H^1,\ f^+ f^- = 0,\ \nabla f^\pm = \begin{cases} \pm\nabla f & (\pm f > 0) \\ 0 & (\pm f \le 0) \end{cases},\ \nabla f^+ \cdot \nabla f^- = 0.$$

補題 4.11 ($u \in H^1(\mathbb{R}^3)$ となる条件) *([4, Proposition 9. 3]).* $u \in L^2(\mathbb{R}^3)$ で $h \neq 0,\ h \in \mathbb{R}^3,\ D_h u := \frac{u(x+h)-u(x)}{|h|}$ と定めるとき,

$$u \in H^1(\mathbb{R}^3) \Longleftrightarrow \exists C \ge 0\ s.t.\ ||D_h u||_{L^2(\mathbb{R}^3)} \le C\ (\forall h \in \mathbb{R}^3).$$

このとき $||D_h u||_{L^2(\mathbb{R}^3)} \le ||\nabla u||_{L^2(\mathbb{R}^3)}$.

補題 4.12 $f \in L^1(\mathbb{R}^3) \cap L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3)$ のとき, C は独立な定数で,

$$\int_{\mathbb{R}^3} \frac{|f(y)|}{|x-y|} dy \le C\left(\int_{\mathbb{R}^3} |f(y)| dy\right)^{\frac{1}{6}} \left(\int_{\mathbb{R}^3} |f(y)|^{\frac{5}{3}} dy\right)^{\frac{1}{2}}.$$

(証明) 平行移動とヘルダーの不等式を使って, 任意の $\tau > 0$ に対し,

$$\begin{aligned}
\int_{\mathbb{R}^3} \frac{|f(y)|}{|x-y|} dy &= \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|f(y+x)|}{|y|} dy \\
&= \int_{|y|<\tau} \frac{|f(y+x)|}{|y|} dy + \int_{|y|>\tau} \frac{|f(y+x)|}{|y|} dy \\
&\le \left(\int_{|y|<\tau} \left(\frac{1}{|y|}\right)^{\frac{5}{2}} dy\right)^{\frac{2}{5}} \left(\int_{|y|<\tau} |f(y+x)|^{\frac{5}{3}} dy\right)^{\frac{3}{5}} \\
&\qquad + \frac{1}{\tau} \int_{|y|>\tau} |f(y+x)| dy \\
&\le C_4 \tau^{\frac{1}{5}} \left(\int_{\mathbb{R}^3} |f|^{\frac{5}{3}} dx\right)^{\frac{3}{5}} + \frac{1}{\tau} \int_{\mathbb{R}^3} |f| dx \\
&=: A\tau^{\frac{1}{5}} + B\frac{1}{\tau} =: g(\tau).
\end{aligned}$$

τ として $\tau^* := \left(\frac{5B}{A}\right)^{\frac{5}{6}}$ をとれば,

$$\int_{\mathbb{R}^3} \frac{|f(y)|}{|x-y|} dy \le g(\tau^*) = \frac{6}{5^{\frac{5}{6}}} A^{\frac{5}{6}} B^{\frac{1}{6}} = C\left(\int_{\mathbb{R}^3} |f(y)| dy\right)^{\frac{1}{6}} \left(\int_{\mathbb{R}^3} |f(y)|^{\frac{5}{3}} dy\right)^{\frac{1}{2}}.$$

補題 4.13 (湯川型ニュートンの定理) $\rho \in L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3)$ かつ ρ が球対称のとき, $\alpha > 0$ として,

$$\begin{aligned}
&\int_{\mathbb{R}^3} \frac{\rho(y) e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|} dy \\
&= \int_{|y|<|x|} \frac{e^{-\alpha|x|} \sinh(\alpha|y|) \rho(y) dy}{\alpha|x||y|} + \int_{|y|>|x|} \frac{e^{-\alpha|y|} \sinh(\alpha|x|) \rho(y) dy}{\alpha|x||y|}. \quad (8)
\end{aligned}$$

別表現として,

$$\int_{\mathbb{R}^3} \frac{\rho(y) e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|} dy = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\rho(y) dy}{\alpha|x||y| \max\{\frac{e^{\alpha|x|}}{\sinh(\alpha|y|)},\ \frac{e^{\alpha|y|}}{\sinh(\alpha|x|)}\}}.$$

特に $\rho \in L^1(\mathbb{R}^3) \cap L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3)$ かつ ρ が球対称のとき, $\alpha \to 0$ と極限をとれば,

$$\int_{\mathbb{R}^3} \frac{\rho(y)}{|x-y|} dy = \int_{|y|<|x|} \frac{\rho(y)dy}{|x|} + \int_{|y|>|x|} \frac{\rho(y)dy}{|y|} = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\rho(y)dy}{\max\{|x|,\ |y|\}}. \tag{9}$$

注意. $\alpha = 0$ で (9) 式が成立することは, ニュートンの定理として既知である. ([5, Section9. 7]).

(証明) step1. $\int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\rho(y)|e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|} dy \le (\int_{\mathbb{R}^3} |\rho(y)|^{\frac{5}{3}} dy)^{\frac{3}{5}} (\int_{\mathbb{R}^3} (\frac{e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|})^{\frac{5}{2}} dy)^{\frac{2}{5}} < \infty$ から以下の極座標による逐次積分は可能である.

式 (8) で $x = (0,\ 0,\ t),\ y = (r\sin\theta\cos\phi,\ r\sin\theta\sin\phi,\ r\cos\theta)$ として極座標で積分すれば,

$$\begin{aligned}
&(L.\,H.\,S)\\
=\ & \int_0^\infty \rho(r)r^2\Big(\int_0^\pi \frac{\exp\{-\alpha(t^2+r^2-2tr\cos\theta)^{\frac{1}{2}}\}}{(t^2+r^2-2tr\cos\theta)^{\frac{1}{2}}}\sin\theta(\int_0^{2\pi} d\phi)d\theta\Big)dr\\
=\ & 2\pi\int_0^\infty \rho(r)r^2\Big(\int_0^\pi \frac{\exp\{-\alpha(t^2+r^2-2tr\cos\theta)^{\frac{1}{2}}\}}{(t^2+r^2-2tr\cos\theta)^{\frac{1}{2}}}\sin\theta d\theta\Big)dr.
\end{aligned}$$

θ の積分は原始関数が見つかるので,

$$\begin{aligned}
(L.\,H.\,S) &= 2\pi\int_0^\infty \rho(r)r^2\Big[\frac{-1}{\alpha tr}\exp\{-\alpha(t^2+r^2-2tr\cos\theta)^{\frac{1}{2}}\}\Big]_{\theta=0}^{\theta=\pi} dr\\
&= 2\pi\int_0^\infty \frac{\rho(r)r^2}{\alpha tr}[\exp\{-\alpha|t-r|\} - \exp\{-\alpha(t+r)\}]dr\\
&= 2\pi\int_0^t \frac{\rho(r)r^2}{\alpha tr}[\exp\{-\alpha(t-r)\} - \exp\{-\alpha(t+r)\}]dr\\
&\quad +2\pi\int_t^\infty \frac{\rho(r)r^2}{\alpha tr}[\exp\{-\alpha(r-t)\} - \exp\{-\alpha(t+r)\}]dr\\
&= 2\pi\int_0^t \frac{\rho(r)r^2}{\alpha tr}e^{-\alpha t}2\sinh(\alpha r)dr + 2\pi\int_t^\infty \frac{\rho(r)r^2}{\alpha tr}e^{-\alpha r}2\sinh(\alpha t)dr\\
&= \int_0^t \frac{\rho(r)e^{-\alpha t}\sinh(\alpha r)}{\alpha tr}4\pi r^2 dr + \int_t^\infty \frac{\rho(r)e^{-\alpha r}\sinh(\alpha t)}{\alpha tr}4\pi r^2 dr.
\end{aligned}$$

$t = |x|,\ r = |y|$ なので,

$$(L.\,H.\,S) = \int_{|y|<|x|} \frac{\rho(r)e^{-\alpha|x|}\sinh(\alpha|y|)}{\alpha|x||y|}dy + \int_{|y|>|x|} \frac{\rho(r)e^{-\alpha|y|}\sinh(\alpha|x|)}{\alpha|x||y|}dy.$$

$|y| < |x|$ では $e^{-\alpha|x|}\sinh(\alpha|y|) < e^{-\alpha|y|}\sinh(\alpha|x|)$,

$|y| > |x|$ では $e^{-\alpha|x|}\sinh(\alpha|y|) > e^{-\alpha|y|}\sinh(\alpha|x|)$ なので,

$$(L.\,H.\,S) = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\rho(r)}{\alpha|x||y|}\min\{e^{-\alpha|x|}\sinh(\alpha|y|),\ e^{-\alpha|y|}\sinh(\alpha|x|)\}dy.$$

通常の $\alpha = 0$ でのニュートンの定理に合わせて, min を max で書き換えれば,

$$(L.\,H.\,S) = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\rho(y)dy}{\alpha|x||y|\max\{\frac{e^{\alpha|x|}}{\sinh(\alpha|y|)},\ \frac{e^{\alpha|y|}}{\sinh(\alpha|x|)}\}}.$$

step2. $\rho \in L^1(\mathbb{R}^3) \cap L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3)$ かつ ρ が球対称のとき, $\alpha \to 0$ の極限をとる.

式 (8) の左辺は, $\lim_{\alpha\to 0} \frac{\rho(y)e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|} = \frac{\rho(y)}{|x-y|}$ 及び補題 4.12 より $|\frac{\rho(y)e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}| \leq \frac{\rho(y)}{|x-y|} \in L^1_y(\mathbb{R}^3)$ なのでルベーグ収束定理より,

$$\lim_{\alpha\to 0}\int_{\mathbb{R}^3} \frac{\rho(y)e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dy = \int_{\mathbb{R}^3}\lim_{\alpha\to 0}\frac{\rho(y)e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dy = \int_{\mathbb{R}^3}\frac{\rho(y)}{|x-y|}dy. \tag{10}$$

式 (8) の右辺第 1 項は, $\lim_{\alpha\to 0} \frac{\chi_{\{|y|<|x|\}}e^{-\alpha|x|}\sinh(\alpha|y|)\rho(y)}{\alpha|x||y|} = \frac{\chi_{\{|y|<|x|\}}\rho(y)}{|x|}$ 及び, $\frac{\sinh(\alpha|y|)}{\alpha|y|}$ は増加関数なので $0 < \alpha < 1$ として $|\frac{\chi_{\{|y|<|x|\}}e^{-\alpha|x|}\sinh(\alpha|y|)\rho(y)}{\alpha|x||y|}| \leq (\frac{\sinh(|x|)}{|x|^2})\chi_{\{|y|<|x|\}}\rho(y) \in L^1_y(\mathbb{R}^3)$ なのでルベーグ収束定理より,

$$\begin{aligned}
&\lim_{\alpha\to 0}\int_{\mathbb{R}^3}\frac{\chi_{\{|y|<|x|\}}e^{-\alpha|x|}\sinh(\alpha|y|)\rho(y)dy}{\alpha|x||y|} \\
=\ &\int_{\mathbb{R}^3}\lim_{\alpha\to 0}\frac{\chi_{\{|y|<|x|\}}e^{-\alpha|x|}\sinh(\alpha|y|)\rho(y)dy}{\alpha|x||y|} \\
=\ &\int_{|y|<|x|}\frac{\rho(y)dy}{|x|}.
\end{aligned} \tag{11}$$

式 (8) の右辺第 2 項は, $\lim_{\alpha\to 0} \frac{\chi_{\{|y|>|x|\}}e^{-\alpha|y|}\sinh(\alpha|x|)\rho(y)}{\alpha|x||y|} = \frac{\chi_{\{|y|>|x|\}}\rho(y)}{|y|}$ 及び, $\frac{\sinh(\alpha|y|)}{\alpha|y|}$ は増加関数なので $0 < \alpha < 1$ として $|\frac{\chi_{\{|y|>|x|\}}e^{-\alpha|y|}\sinh(\alpha|x|)\rho(y)}{\alpha|x||y|}| \leq (\frac{\sinh(|x|)}{|x|^2})\chi_{\{|y|>|x|\}}\rho(y) \in L^1_y(\mathbb{R}^3)$ なのでルベーグ収束定理より,

$$\begin{aligned}
&\lim_{\alpha\to 0}\int_{\mathbb{R}^3}\frac{\chi_{\{|y|>|x|\}}e^{-\alpha|y|}\sinh(\alpha|x|)\rho(y)dy}{\alpha|x||y|} \\
=\ &\int_{\mathbb{R}^3}\lim_{\alpha\to 0}\frac{\chi_{\{|y|>|x|\}}e^{-\alpha|y|}\sinh(\alpha|x|)\rho(y)dy}{\alpha|x||y|} \\
=\ &\int_{|y|>|x|}\frac{\rho(y)dy}{|y|}.
\end{aligned} \tag{12}$$

式 (10), (11), (12) よりニュートンの定理の式 (9) が得られた.

4.2 内積 $D_\alpha(f,\ g)$ についての補題

補題 4.14 $\alpha > 0$ とする. 実関数 $f,\ g \in L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3)$ に対し, 定数 $C > 0$ があって,

$$D_\alpha(f,\ g) \leq C||f||_{\frac{5}{3}(\mathbb{R}^3)}||g||_{\frac{5}{3}(\mathbb{R}^3)}.$$

(証明) $h_\alpha(x) := \frac{e^{-\alpha|x|}}{|x|}$ として, ヘルダーの不等式と合成積のヤングの不等式

を使って,

$$\begin{aligned}D_\alpha(f,\ g): &= \frac{1}{2}\int \frac{f(x)g(y)e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dxdy = \frac{1}{2}\int f(x)(g*h_\alpha)(x)dx \\ &\le \frac{1}{2}||f||_{L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3)}||g*h_\alpha||_{L^{\frac{5}{2}}(\mathbb{R}^3)} \le \frac{1}{2}||f||_{L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3)}||g||_{L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3)}||h_\alpha||_{L^{\frac{5}{4}}(\mathbb{R}^3)} \\ &\le C||f||_{L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3)}||g||_{L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3)}.\end{aligned}$$

補題 4.15 (C_c^∞ 関数の $D_\alpha(f,\ g)$ での稠密性) $\alpha > 0$ とする. 実関数 $f,\ g \in L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3)$ に対し

$\exists\{\phi_n\},\ \{\psi_n\} \subset C_c^\infty s.\,t.\ n \to \infty$ で $\phi_n \to f$ in $L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3)$ かつ $\psi_n \to g$ in $L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3)$ であるが, さらに次が成り立つ.

$$D_\alpha(\phi_n,\ \psi_n) \to D_\alpha(f,\ g).$$

(証明) $D_\alpha(\phi_n,\ \psi_n) \to D_\alpha(f,\ g)$ を示す. 三角不等式より,

$$|D_\alpha(f,\ g) - D_\alpha(\phi_n,\ \psi_n)| \le |D_\alpha(f,\ g-\psi_n)| + |D_\alpha(f-\phi_n,\ \psi_n)|. \tag{13}$$

$h_\alpha(x) := \frac{e^{-\alpha|x|}}{|x|}$ とおく. 補題 4.14 より,

$$|D_\alpha(f,\ g-\psi_n)| \le ||f||_{\frac{5}{3}}||(g-\psi_n)||_{\frac{5}{3}}||h_\alpha||_{\frac{5}{4}} \to 0, \tag{14}$$

$$\begin{aligned}|D_\alpha(f-\phi_n,\ \psi_n)| &\le ||\psi_n||_{\frac{5}{3}}||(f-\phi_n)||_{\frac{5}{3}}||h_\alpha||_{\frac{5}{4}} \\ &\le C||(f-\phi_n)||_{\frac{5}{3}}||h_\alpha||_{\frac{5}{4}} \to 0.\end{aligned} \tag{15}$$

最後の行は, $||\psi_n||_{\frac{5}{3}} \to ||g||_{\frac{5}{3}}$ より $||\psi_n||_{\frac{5}{3}}$ が有界列となり, 定数 C で押さえられることによる. 式（13）（14）（15）より $D_\alpha(\phi_n,\ \psi_n) \to D_\alpha(f,\ g)$ となる.

補題 4.16 $\alpha > 0$ とする.

(1)$f \in L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3)$ のとき, $D_\alpha(f,\ f) \ge 0$. 等号成立条件は $f = 0$.

(2)(シュヴァルツ不等式)$f,\ g \in L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3)$ のとき,

$$D_\alpha(f,\ g)^2 \le D_\alpha(f,\ f)D_\alpha(g,\ g).$$

等号成立条件は $g = 0$ または C を実定数として $f = Cg$.

(3)$D_\alpha(f,\ f)$ は狭義凸汎関数. つまり $f,\ g \in L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3),\ f \ne g,\ 0 < t < 1$ として,

$$D_\alpha(tf+(1-t)g,\ tf+(1-t)g) < tD_\alpha(f,\ f) + (1-t)D_\alpha(g,\ g).$$

注意. $\alpha = 0$ でも成立する. ([5, Section9. 8]).

((1) の証明.) step1. まず $D_\alpha(f,\ f) \ge 0$ を示す. 補題 4.15 より, $f \in C_c^\infty(\mathbb{R}^3)$ として, $D_\alpha(f,\ f) \ge 0$ を示せばよい. $h_\alpha(x) := \frac{e^{-\alpha|x|}}{|x|}$ として, $f,\ h_\alpha,\ f*h_\alpha \in L^2(\mathbb{R}^3)$ よりフーリエ変換の一般論から,

$$(\mathcal{F}u)(\xi) := \lim_{N\to\infty}(2\pi)^{-\frac{3}{2}}\int_{|x|<N} u(x)e^{-i\xi\cdot x}dx \text{（}L^2(\mathbb{R}^3)\text{ 収束）}$$

として,

$$
\begin{aligned}
D_\alpha(f,\ f) &= \int f(f * h_\alpha)dx = \int (\mathcal{F}^* f)\mathcal{F}(f * h_\alpha)d\xi \\
&= \int (\mathcal{F}^* f)(2\pi)^{\frac{3}{2}}(\mathcal{F} f)(\mathcal{F} h_\alpha) \\
&= 4\pi \int |\mathcal{F} f|^2 \frac{1}{|\xi|^2+\alpha^2} d\xi \geq 0.
\end{aligned}
$$

最後の式は $(2\pi)^{\frac{3}{2}}(\mathcal{F} h_\alpha)(\xi) = \int \frac{e^{-\alpha|x|}e^{-ix\cdot\xi}}{|x|}dx = \frac{4\pi}{|\xi|^2+\alpha^2}$ を用いたが, この式は以下のように導かれる.

$$
\begin{aligned}
(2\pi)^{\frac{3}{2}}(\mathcal{F} h_\alpha)(\xi) &= \int \frac{e^{-\alpha|x|}e^{-ix\cdot\xi}}{|x|}dx \\
&= \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{e^{-\alpha r}e^{-ir|\xi|\cos\theta}}{r} r^2 \sin\theta d\phi d\theta dr \\
&= 2\pi \int_0^\infty \Big(\int_0^\pi e^{-ir|\xi|\cos\theta} \sin\theta d\theta \Big) r e^{-\alpha r} dr \\
&= 2\pi \int_0^\infty \Big[\frac{e^{-ir|\xi|\cos\theta}}{ir|\xi|} \Big]_{\theta=0}^{\theta=\pi} r e^{-\alpha r} dr \\
&= \frac{4\pi}{|\xi|} \int_0^\infty e^{-\alpha r} \sin(|\xi| r) dr =: \frac{4\pi}{|\xi|} I
\end{aligned} \tag{16}
$$

この I は次のように部分積分を 2 回すれば求まり,

$$
\begin{aligned}
I &= \frac{-1}{\alpha}\Big[e^{-\alpha r}\sin(|\xi|r)\Big]_{r=0}^{r=\infty} + \frac{|\xi|}{\alpha}\int_0^\infty e^{-\alpha r}\cos(|\xi|r)dr \\
&= \frac{|\xi|}{\alpha}\Big(\frac{-1}{\alpha}\Big[e^{-\alpha r}\cos(|\xi|r)\Big]_{r=0}^{r=\infty} - \frac{|\xi|}{\alpha} I\Big) = \frac{|\xi|}{\alpha^2} - \frac{|\xi|^2}{\alpha^2} I \\
\therefore \quad & I = \frac{|\xi|}{|\xi|^2+\alpha^2}
\end{aligned} \tag{17}
$$

(16), (17) より

$$
(2\pi)^{\frac{3}{2}}(\mathcal{F} h_\alpha)(\xi) = \frac{4\pi}{|\xi|^2+\alpha^2} \tag{18}
$$

step2. (1) での等号成立条件を示す. 逆は自明なので, $D_\alpha(f,\ f) = 0$ ならば $f = 0$ であることを示す. $f \in L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3)$ かつ $D_\alpha(f,\ f) = 0$ ならば $f = 0$ のとき, 補題 4.15 から, $\exists\{\phi_n\} \subset C_c^\infty s.\ t.\ n \to \infty$ で $\phi_n \to f$ in $L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3)$ かつ $D_\alpha(\phi_n,\ \phi_n) \to D_\alpha(f,\ f) = 0$. このとき $||\mathcal{F} f||_{\frac{5}{2}} \leq C||f||_{\frac{5}{3}}$([13, 14 章定理 14.18] 参照) より, $||\mathcal{F}\phi_n - \mathcal{F} f||_{\frac{5}{2}} \leq C||\phi_n - f||_{\frac{5}{3}} \to 0 (n \to \infty)$. これよりある部分列があって（部分列も $\{\phi_n\}$ で表記）各点 ξ で

$$
\mathcal{F}\phi_n(\xi) \to \mathcal{F} f(\xi)\ (a.\ e.\ \xi)\ (n \to \infty). \tag{19}
$$

一方

$$
D_\alpha(\phi_n,\ \phi_n) = 4\pi \int |\mathcal{F}\phi_n|^2 \frac{1}{|\xi|^2+\alpha^2} d\xi \to 0\ (n \to \infty).
$$

つまり $\||\mathcal{F}\phi_n|^2\frac{1}{|\xi|^2+\alpha^2}\|_1 \to 0\ (n\to\infty)$ よりさらに部分列をとって（この部分列も $\{\phi_n\}$ で表記）各点 ξ で $|\mathcal{F}\phi_n|^2\frac{1}{|\xi|^2+\alpha^2} \to 0\ (a.\,e.\,\xi)\ (n\to\infty)$ なので,

$$\mathcal{F}\phi_n(\xi) \to 0\ (a.\,e.\,\xi)\ (n\to\infty). \tag{20}$$

式（19)（20) から $\mathcal{F}f(\xi)=0(a.\,e.\,\xi)$, これより $f=0$.

なぜなら緩増加超関数の空間を $\mathscr{S}'$ として, $f\in L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3)\subset\mathscr{S}'$ であり, フーリエ変換は $\mathscr{S}'$ から $\mathscr{S}'$ への同型写像（特に単射）なので, $\mathcal{F}f(\xi)=0$ ならば $f=0$ といえる.

((2) の証明.) 補題 4.16(1) より, $f,\ g\in L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3)$ のとき, 任意の実数 t に対し,

$$0\le D_\alpha(f-tg,\ f-tg)=D_\alpha(g,\ g)t^2-2D_\alpha(g,\ f)t+D_\alpha(f,\ f).$$

$D_\alpha(g,\ g)=0$ の場合. $D_\alpha(g,\ f)=0$ となり成立.

$D_\alpha(g,\ g)\neq0$ の場合. (判別式）$=D_\alpha(g,\ f)^2-D_\alpha(g,\ g)D_\alpha(f,\ f)\le0$ となり成立.

等号成立条件. 逆は自明なので $D_\alpha(f,\ g)^2=D_\alpha(f,\ f)D_\alpha(g,\ g)\to g=0$ または $f=Cg$（C は実数）を示す.

$g=0$ の場合成立. $g\neq0$ の場合,

$$\begin{aligned}&D_\alpha\left(\frac{D_\alpha(f,\ g)}{D_\alpha(g,\ g)}g-f,\ \frac{D_\alpha(f,\ g)}{D_\alpha(g,\ g)}g-f\right)\\ =\ &\frac{1}{D_\alpha(g,\ g)}(D_\alpha(f,\ g)^2-2D_\alpha(f,\ g)^2+D_\alpha(g,\ g)D_\alpha(f,\ f))=0.\end{aligned}$$

これより $f=\frac{D_\alpha(f,\ g)}{D_\alpha(g,\ g)}g$.

((3) の証明.) $f\neq g,\ 0<t<1$ で,

$$\begin{aligned}&tD_\alpha(f,\ f)+(1-t)D_\alpha(g,\ g)-D_\alpha(tf+(1-t)g,\ tf+(1-t)g)\\ =\ &t(1-t)(D_\alpha(f,\ f)-2D_\alpha(f,\ g)+D_\alpha(g,\ g))\\ =\ &t(1-t)D_\alpha(f-g,\ f-g)>0.\end{aligned}$$

補題 4.17 *([5, Section6. 23]).* $\rho\in L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3)$, $V_{\alpha,\ \rho}(x):=\frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|}-\int\frac{\rho(y)e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dy$ とおくと,

$$\begin{aligned}&V_{\alpha,\ \rho}\in C(\mathbb{R}^3\backslash\{0\}),\ V_{\alpha,\ \rho}(x)\to0\ (|x|\to\infty),\\ &(\Delta-\alpha^2)V_{\alpha,\ \rho}=4\pi\rho\ \text{in}\ \mathcal{D}'(\mathbb{R}^3\backslash\{0\}).\end{aligned} \tag{21}$$

特に $\rho\in C^\infty(\mathbb{R}^3\backslash\{0\})$ で球対称なら,

$$(\Delta-\alpha^2)V_{\alpha,\ \rho}=4\pi\rho\ \text{in}\ \mathbb{R}^3\backslash\{0\}. \tag{22}$$

注意. $\alpha=0$ でも成立する. ([5, Section6. 21]).

(証明) $\rho\in L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3)$, $\frac{e^{-\alpha|x|}}{|x|}\in L^{\frac{5}{2}}(\mathbb{R}^3)$ より補題 4.2 から $\int\frac{\rho(y)e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dy$ は連続で, 無限遠で 0 に収束する. これより $V_{\alpha,\ \rho}\in C(\mathbb{R}^3\backslash\{0\})$, $V_{\alpha,\ \rho}(x)\to0(|x|\to\infty)$.

step1.

$$(\Delta-\alpha^2)(\frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|})=0 \text{ in } \mathcal{D}'(\mathbb{R}^3\backslash 0).$$

これを示す. $\phi\in C_c^\infty(\mathbb{R}^3\backslash\{0\})$ として, ある $\epsilon>0$ があって, supp $\phi\subset\mathbb{R}^3\backslash B(\epsilon)$ となり, $\partial B(\epsilon)$ 表面積分が 0 なのでガウスの発散定理を 2 回使って, $\Delta\frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|}=\alpha^2\frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|}$ に注意して,

$$\begin{aligned}\int_{\mathbb{R}^3}\frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|}\Delta\phi dx &= \int_{\mathbb{R}^3\backslash B(\epsilon)}\frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|}\Delta\phi dx\\ &= \int_{\mathbb{R}^3\backslash B(\epsilon)}(\Delta\frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|})\phi dx\\ &= \alpha^2\int_{\mathbb{R}^3\backslash B(\epsilon)}\frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|}\phi dx=\alpha^2\int_{\mathbb{R}^3}\frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|}\phi dx.\end{aligned}$$

step2.

$$(\Delta_x-\alpha^2)(\frac{Ze^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|})=-4\pi\delta(x-y) \text{ in } \mathcal{D}'(\mathbb{R}^3).$$

これを示す. $\phi\in C_c^\infty(\mathbb{R}^3)$ として $\int_{\mathbb{R}^3}\frac{e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}(\Delta_x-\alpha^2)\phi(x)dx=-4\pi\phi(y)$ を示せばよい. 球面 $\partial B(\epsilon)$ の外向き法線を n としてガウスの発散定理から,

$$\begin{aligned}I: &= \int_{\mathbb{R}^3}\frac{e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}\Delta\phi(x)dx=\int_{\mathbb{R}^3}\frac{e^{-\alpha|z|}}{|z|}\Delta_z\phi(z+y)dz\\ &= \lim_{\epsilon\to0}\int_{\mathbb{R}^3\backslash B(\epsilon)}\frac{e^{-\alpha|z|}}{|z|}\Delta_z\phi(z+y)dz\\ &= \lim_{\epsilon\to0}\{\int_{\partial B(\epsilon)}\frac{e^{-\alpha|z|}}{|z|}\nabla_z\phi(z+y)\cdot(-n)dS\\ &\qquad -\int_{\mathbb{R}^3\backslash B(\epsilon)}(\nabla_z\frac{e^{-\alpha|z|}}{|z|})\cdot\nabla_z\phi(z+y)dz\}\end{aligned}$$

定数 C があって $|\frac{e^{-\alpha|z|}}{|z|}\nabla_z\phi(z+y)\cdot(-n)|\le\frac{C}{\epsilon}$ より第 1 項は 0 に収束する. 第 2 項は再びガウスの発散定理から,

$$\begin{aligned}I: &= \lim_{\epsilon\to0}\{\int_{\partial B(\epsilon)}(-n\cdot\nabla_z\frac{e^{-\alpha|z|}}{|z|})\phi(z+y)dS+\int_{\mathbb{R}^3\backslash B(\epsilon)}(\Delta_z\frac{e^{-\alpha|z|}}{|z|})\phi(z+y)dz\}\\ &= \lim_{\epsilon\to0}\{\int_{\partial B(\epsilon)}(\frac{-e^{-\alpha r}}{r^2}+\frac{-\alpha e^{-\alpha r}}{r})\phi(z+y)dS+\int_{\mathbb{R}^3\backslash B(\epsilon)}\alpha^2\frac{e^{-\alpha|z|}}{|z|}\phi(z+y)dz\}\\ &= -4\pi\phi(y)+\alpha^2\int_{\mathbb{R}^3}\frac{e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}\phi(x)dx.\end{aligned}$$

step3.

$$(\Delta_x-\alpha^2)(-\int\frac{\rho(y)e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dy)=4\pi\rho(x) \text{ in } \mathcal{D}'(\mathbb{R}^3).$$

これを示す. $\forall\phi\in C_c^\infty(\mathbb{R}^3)$ で,

$$\begin{aligned}&\int(-\int\frac{\rho(y)e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dy)(\Delta_x\phi(x))dx\\&=\alpha^2\int(-\int\frac{\rho(y)e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dy)\phi(x)dx+4\pi\int\rho\phi dx\end{aligned}\tag{23}$$

を示せばよい. 補題 4.14 より $\frac{\rho(y)e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}(\Delta_x\phi(x))=D_\alpha(\rho,\ \Delta\phi)\in L^1(\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3)$, $\frac{\rho(y)e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}(\phi(x))=D_\alpha(\rho,\ \phi)\in L^1(\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3)$ より, フビニの定理から,

$$\begin{aligned}(L.\ H.\ S)&=&&-\int\rho(y)(\int\frac{e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}(\Delta_x\phi(x))dx)dy\\&=&&-\int\rho(y)(\alpha^2\int\frac{e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}\phi(x)dx-4\pi\phi(y))dy\ \ (step2\text{ から})\\&=&&\alpha^2\int(-\int\frac{\rho(y)e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dy)\phi(x)dx+4\pi\int\rho\phi dx.\end{aligned}$$

以上 step1, 3 より結果 (21) が得られる.

step4. 特に $\rho\in C^\infty(\mathbb{R}^3\backslash\{0\})$ で球対称場合. 補題4.13 の (8) より, $|x|=r,\ |y|=s$ とし, $\rho(y)=\rho(s)$ と表記すれば,

$$\begin{aligned}&\int\frac{\rho(y)e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dy\\&=\frac{e^{-\alpha r}}{r}\int_0^r\frac{4\pi s^2\rho(s)\sinh(\alpha s)}{\alpha s}ds+\frac{\sinh(\alpha r)}{\alpha r}\int_r^\infty 4\pi s^2\rho(s)\frac{e^{-\alpha s}}{s}ds.\end{aligned}$$

これより, $\rho\in C^\infty(\mathbb{R}^3\backslash\{0\})$ で球対称なら, $\int\frac{\rho(y)e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dy\in C^\infty(\mathbb{R}^3\backslash\{0\})$. 微分できることがわかったので, $\phi\in C_c^\infty(\mathbb{R}^3\backslash\{0\})$ とすれば, $step3$ の (23) 式の左辺でガウスの発散定理を 2 回使うことができ, 表面積分が 0 なので,

$$\begin{aligned}&\int\Big(\Delta_x(-\int\frac{\rho(y)e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dy)\Big)\phi(x)dx\\&=\alpha^2\int(-\int\frac{\rho(y)e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dy)\phi(x)dx+4\pi\int\rho\phi dx.\end{aligned}$$

変分法の基本補題より,

$$(\Delta_x-\alpha^2)(-\int\frac{\rho(y)e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dy)=4\pi\rho(x)\ (a.\ e.\ x\in\mathbb{R}^3).$$

両辺とも $\mathbb{R}^3\backslash\{0\}$ で連続なので

$$(\Delta_x-\alpha^2)(-\int\frac{\rho(y)e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dy)=4\pi\rho(x)\ (x\in\mathbb{R}^3\backslash\{0\})).$$

直接計算すれば $\mathbb{R}^3\backslash\{0\}$ で $(\Delta_x-\alpha^2)\frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|}=0$ である. また $V_{\alpha,\ \rho}(x):=\frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|}-\int\frac{\rho(y)e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dy$ なので,

$$(\Delta-\alpha^2)V_{\alpha,\ \rho}=4\pi\rho\text{ in }\mathbb{R}^3\backslash\{0\}.$$

4.3 エネルギー汎関数の $L^{\frac{5}{3}}$– 弱下半連続性などのあとで使う補題

補題 4.18 ($\mathscr{E}_\alpha(\rho)$, $\mathscr{E}(\rho)$ **の下半連続性)**

(1)(YTF 模型で $\alpha > 0$ *の場合)* $\{\rho_n\}_{n=1}^{\infty} \subset \mathscr{T}$, $\rho_0 \in L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3)$, $\rho_n \rightharpoonup \rho_0$ in $L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3)$ を仮定すれば, $\alpha > 0$ で, $\rho_0 \in \mathscr{T}$, $\liminf_{n\to\infty} \mathscr{E}_\alpha(\rho_n) \geq \mathscr{E}_\alpha(\rho_0)$ となる.

(2)(BTF 模型で) $\{\rho_n\}_{n=1}^{\infty} \subset \mathscr{T}_R$, $\rho_0 \in L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3)$, $\rho_n \rightharpoonup \rho_0$ in $L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3)$ と仮定すると, $\rho_0 \in \mathscr{T}_R$, $\liminf_{n\to\infty} \mathscr{E}(\rho_n) \geq \mathscr{E}(\rho_0)$ となる.

(3)(YTF 模型で $\alpha = 0$ *の場合及び BTF 模型で)* $1 < r \leq \frac{5}{3}$ なる任意の r に対して, $\{\rho_n\}_{n=1}^{\infty} \subset \mathscr{T}_{TF}$, $\rho_0 \in L^r(\mathbb{R}^3) \cap L^1(\mathbb{R}^3)$, $\rho_n \rightharpoonup \rho_0$ in $L^r(\mathbb{R}^3)$ を仮定すれば, $\rho_0 \in \mathscr{T}_{TF}$, $\liminf_{n\to\infty} \mathscr{E}(\rho_n) \geq \mathscr{E}(\rho_0)$ となる.

(1) の証明.

$A := \{x|\rho_0(x) < 0\}$, $A_{kl} := \{x||x| \leq k,\ \rho_0(x) \leq \frac{-1}{l},\ k,\ l \in \mathbb{N}\}$ とおくと $\chi_{A_{kl}} \in L^{\frac{5}{2}}(\mathbb{R}^3)$ かつ $\chi_{A_{kl}} \geq 0$ より $0 \leq \lim_{n\to\infty} \int \chi_{A_{kl}}\rho_n = \int \chi_{A_{kl}}\rho_0 \leq \frac{-1}{l}|A_{kl}|$. これより $|A_{kl}| = 0$. ゆえに $|A| = |\cup_{k,l\in\mathbb{N}} A_{kl}| \leq \Sigma_{k,l\in\mathbb{N}}|A_{kl}| = 0$ すなわち $\rho_0(x) \geq 0$ $(a.\ e.\ x)$. よって $\rho_0 \in \mathscr{T}$.

$\rho_n \rightharpoonup \rho_0$ in $L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3)$ なので,

$$\liminf_{n\to\infty} \int \rho_n^{\frac{5}{3}} dx \geq \int \rho_0^{\frac{5}{3}} dx. \tag{24}$$

$\rho_n \rightharpoonup \rho_0$ in $L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3)$ かつ $\frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|} \in L^{\frac{5}{2}}(\mathbb{R}^3)$ より,

$$\lim_{n\to\infty} \int \frac{\rho_n Ze^{-\alpha|x|}}{|x|} dx = \int \frac{\rho_0 Ze^{-\alpha|x|}}{|x|} dx. \tag{25}$$

補題 4.1 の合成積のヤングの不等式より, $||\rho_0 * \frac{e^{-\alpha|x|}}{|x|}||_{\frac{5}{2}} \leq ||\rho_0||_{\frac{5}{3}} ||\frac{e^{-\alpha|x|}}{|x|}||_{\frac{5}{4}}$ なので,

$\rho_0 * \frac{e^{-\alpha|x|}}{|x|} = \int \frac{\rho_0(y)e^{\alpha|x-y|}}{|x-y|} dy \in L^{\frac{5}{2}}(\mathbb{R}^3)$. これと $\rho_n \rightharpoonup \rho_0$ in $L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3)$ から,

$$\begin{aligned}\lim_{n\to\infty} D_\alpha(\rho_n,\ \rho_0) &= \lim_{n\to\infty} \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \rho_n(x) \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\rho_0(y)e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|} dydx \\ &= \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \rho_0(x) \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\rho_0(y)e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|} dydx = D_\alpha(\rho_0,\ \rho_0).\end{aligned} \tag{26}$$

補題 4.16(2) より $D_\alpha(\rho_n,\ \rho_0)^2 \leq D_\alpha(\rho_0,\ \rho_0)D_\alpha(\rho_n,\ \rho_n)$ だが, $n \to \infty$ とすれば, 式 (26) より,

$$D_\alpha(\rho_0,\ \rho_0)^2 \leq D_\alpha(\rho_0,\ \rho_0) \liminf_{n\to\infty} D_\alpha(\rho_n,\ \rho_n).$$

これより,

$$\liminf_{n\to\infty} \int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \frac{\rho_n(x)\rho_n(y)e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|} dx \geq \int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \frac{\rho_0(x)\rho_0(y)e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|} dx. \tag{27}$$

式（24),（25),（27) から，

$$\begin{aligned}
& \liminf_{n\to\infty} \mathscr{E}_\alpha(\rho_n) \\
\geq\ & \liminf_{n\to\infty} \frac{3}{5}\int \rho_n^{\frac{5}{3}} dx - \lim_{n\to\infty}\int \frac{\rho_n Z e^{-\alpha|x|}}{|x|}dx \\
& \qquad\qquad + \liminf_{n\to\infty}\int \frac{\rho_n(x)\rho_n(y)e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dxdy \\
\geq\ & \mathscr{E}_\alpha(\rho_0).
\end{aligned}$$

(2) の証明. **step1.** $\rho_0 \in \mathscr{T}$ を示す.

$A := \{x | \rho_0(x) < 0\}$, $A_{kl} := \{x | |x| \leq k,\ \rho_0(x) \leq \frac{-1}{l},\ k,\ l \in \mathbb{N}\}$ とおくと $\chi_{A_{kl}} \in L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3)$ かつ $\chi_{A_{kl}} \geq 0$ より $0 \leq \lim_{n\to\infty}\int \chi_{A_{kl}}\rho_n = \int_{\mathbb{R}^3}\chi_{A_{kl}}\rho_0 \leq \frac{-1}{l}|A_{kl}|$. これより $|A_{kl}| = 0$. ゆえに $|A| = |\cup_{k,l\in\mathbb{N}} A_{kl}| \leq \Sigma_{k,l\in\mathbb{N}}|A_{kl}| = 0$. すなわち $\rho_0(x) \geq 0$ $(a.\,e.\,x)$.

$D := \{x \mid |x| \geq R,\ \rho_0(x) > 0\}$, $D_{kl} := \{x \mid R \leq |x| \leq k,\ \rho_0(x) \geq \frac{1}{l},\ k,\ l \in \mathbb{N},\ R \leq k\}$ とおくと $\chi_{D_{kl}} \in L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3)$ かつ $\rho_n\chi_{D_{kl}} = 0$ より $0 = \lim_{n\to\infty}\int \chi_{D_{kl}}\rho_n = \int_{\mathbb{R}^3}\chi_{D_{kl}}\rho_0 \geq \frac{1}{l}|D_{kl}|$. これより $|D_{kl}| = 0$. ゆえに $|D| = |\cup_{k,l\in\mathbb{N}} D_{kl}| \leq \Sigma_{k,l\in\mathbb{N}}|D_{kl}| = 0$. すなわち $\rho_0(x) = 0$ $(a.\,e.\,x \in \{x \mid |x| \geq R\})$.

$\rho_0 \in L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3)$, $\rho_0(x) \geq 0$ $(a.\,e.\,x)$, $\rho_0(x) = 0$ $(a.\,e.\,x \in \{x \mid |x| \geq R\})$ の 3 点から $\rho_0 \in \mathscr{T}_R$.

step2. $\liminf_{n\to\infty}\mathscr{E}(\rho_n) \geq \mathscr{E}(\rho_0)$ を示す.

$\rho_n \rightharpoonup \rho_0$ in $L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3)$ なので,

$$\liminf_{n\to\infty}\int \rho_n^{\frac{5}{3}}dx \geq \int \rho_0^{\frac{5}{3}}dx. \tag{28}$$

$\rho_n \rightharpoonup \rho_0$ in $L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3)$ かつ $\frac{Z\chi_{B(R)}(x)}{|x|} \in L^{\frac{5}{2}}(\mathbb{R}^3)$ より，

$$\lim_{n\to\infty}\int \frac{\rho_n Z\chi_{B(R)}(x)}{|x|}dx = \int \frac{\rho_0 Z\chi_{B(R)(x)}}{|x|}dx. \tag{29}$$

補題 4.1 の合成積のヤングの不等式より，$||\rho_0 * \frac{\chi_{B(2R)}(x)}{|x|}||_{\frac{5}{2}} \leq ||\rho_0||_{\frac{5}{3}}||\frac{\chi_{B(2R)}(x)}{|x|}||_{\frac{5}{4}}$ なので,

$\rho_0 * \frac{\chi_{B(2R)}(x)}{|x|} = \int \frac{\rho_0(y)\chi_{B(2R)}(x-y)}{|x-y|}dy \in L^{\frac{5}{2}}(\mathbb{R}^3)$. これと $\rho_n \rightharpoonup \rho_0$ in $L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3)$ から,

$$\begin{aligned}
\lim_{n\to\infty} D(\rho_n,\ \rho_0) &= \lim_{n\to\infty}\frac{1}{2}\int \rho_n(x)\int \frac{\rho_0(y)\chi_{B(2R)}(x-y)}{|x-y|}dydx \\
&= \frac{1}{2}\int \rho_0(x)\int \frac{\rho_0(y)\chi_{B(2R)}(x-y)}{|x-y|}dydx = D(\rho_0,\ \rho_0).
\end{aligned} \tag{30}$$

補題 4.16(2) より $D(\rho_n,\ \rho_0)^2 \leq D(\rho_0,\ \rho_0)D(\rho_n,\ \rho_n)$ だが, $n \to \infty$ とすれば, 式 (30) より,

$$D(\rho_0,\ \rho_0)^2 \leq D(\rho_0,\ \rho_0)\liminf_{n\to\infty} D(\rho_n,\ \rho_n).$$

これより,

$$\liminf_{n\to\infty}\int\frac{\rho_n(x)\rho_n(y)\chi_{B(2R)}(x-y)}{|x-y|}dx \geq \int\frac{\rho_0(x)\rho_0(y)\chi_{B(2R)}(x-y)}{|x-y|}dx. \quad (31)$$

式（28)（29)（31) から,

$$\begin{aligned}
&\liminf_{n\to\infty}\mathscr{E}(\rho_n)\\
\geq\ &\liminf_{n\to\infty}\frac{3}{5}\int\rho_n^{\frac{5}{3}}dx-\lim_{n\to\infty}\int\frac{\rho_n Z\chi_{B(R)}(x)}{|x|}dx\\
&\qquad+\liminf_{n\to\infty}\int\frac{\rho_n(x)\rho_n(y)\chi_{B(2R)}(x-y)}{|x-y|}dxdy\\
\geq\ &\mathscr{E}_\alpha(\rho_0).
\end{aligned}$$

step3. さらに $\{\rho_n\}_{n=1}^\infty\subset\mathscr{T}_R$ を仮定すれば $\rho_0\in\mathscr{T}_R$ となることを示す.

(3) の証明. $A:=\{x|\rho_0(x)<0\}$, $A_{kl}:=\{x||x|\leq k,\ \rho_0(x)\leq\frac{-1}{l},\ k,\ l\in\mathbb{N}\}$ とおくと $\chi_{A_{kl}}\in L^{\frac{5}{2}}(\mathbb{R}^3)$ かつ $\chi_{A_{kl}}\geq 0$ より $0\leq\lim_{n\to\infty}\int\chi_{A_{kl}}\rho_n=\int\chi_{A_{kl}}\rho_0\leq\frac{-1}{l}|A_{kl}|$. これより $|A_{kl}|=0$. ゆえに $|A|=|\cup_{k,l\in\mathbb{N}}A_{kl}|\leq\Sigma_{k,l\in\mathbb{N}}|A_{kl}|=0$ すなわち $\rho_0(x)\geq 0\ (a.\,e.\,x)$. すでに $\rho_0\in L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3)\cap L^1(\mathbb{R}^3)$ なので, $\rho_0\in\mathscr{T}_{TF}$.

$\rho_n\rightharpoonup\rho_0$ in $L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3)$ なので,

$$\liminf_{n\to\infty}\int\rho_n^{\frac{5}{3}}dx\geq\int\rho_0^{\frac{5}{3}}dx. \quad (32)$$

$\frac{Z}{|x|}=\chi_{\{|x|<1\}}\frac{Z}{|x|}+\chi_{\{|x|>1\}}\frac{Z}{|x|}\in L^{\frac{5}{2}}(\mathbb{R}^3)+L^4(\mathbb{R}^3)$ 及び $\rho_n\rightharpoonup\rho_0$ in $L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3)$ かつ $L^{\frac{4}{3}}(\mathbb{R}^3)$ より,

$$\begin{aligned}
\lim_{n\to\infty}\int\rho_n\frac{Z}{|x|}dx&=\lim_{n\to\infty}\int\rho_n\chi_{\{|x|<1\}}\frac{Z}{|x|}dx+\lim_{n\to\infty}\int\rho_n\chi_{\{|x|>1\}}\frac{Z}{|x|}dx\\
&=\int\rho_0\chi_{\{|x|<1\}}\frac{Z}{|x|}dx+\int\rho_0\chi_{\{|x|>1\}}\frac{Z}{|x|}dx=\int\rho_0\frac{Z}{|x|}dx. \quad (33)
\end{aligned}$$

補題 4.1 の合成積のヤングの不等式から,

$$\begin{aligned}
&\rho_0\in L^{\frac{5}{4}}(\mathbb{R}^3)\text{ かつ}\chi_{\{|x|<1\}}\frac{Z}{|x|}\in L^{\frac{5}{2}}(\mathbb{R}^3)\text{ より}\rho_0*\chi_{\{|x|<1\}}\frac{Z}{|x|}\in L^5(\mathbb{R}^3),\\
&\rho_0\in L^{\frac{8}{7}}(\mathbb{R}^3)\text{ かつ}\chi_{\{|x|<1\}}\frac{Z}{|x|}\in L^4(\mathbb{R}^3)\text{ より}\rho_0*\chi_{\{|x|>1\}}\frac{Z}{|x|}\in L^8(\mathbb{R}^3).
\end{aligned}$$

これらから,

$$\begin{aligned}
&\rho_0*\chi_{\{|x|<1\}}\frac{Z}{|x|}\in L^5(\mathbb{R}^3)\text{ に対し, }\rho_n\rightharpoonup\rho_0\text{ in }L^{\frac{5}{4}}(\mathbb{R}^3),\\
&\rho_0*\chi_{\{|x|<1\}}\frac{Z}{|x|}\in L^8(\mathbb{R}^3)\text{ に対し, }\rho_n\rightharpoonup\rho_0\text{ in }L^{\frac{8}{7}}(\mathbb{R}^3).
\end{aligned}$$

これらから,

$$
\begin{aligned}
&\lim_{n\to\infty} D_0(\rho_n,\ \rho_0) = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^3} \rho_n(x)(\rho_0 * \frac{Z}{|x|})(x)dx \\
&= \lim_{n\to\infty} \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^3} \rho_n(x)(\rho_0 * \chi_{\{|x|<1\}}\frac{Z}{|x|})(x)dx \\
&\qquad\qquad + \lim_{n\to\infty} \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^3} \rho_n(x)(\rho_0 * \chi_{\{|x|>1\}}\frac{Z}{|x|})(x)dx \\
&= \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^3} \rho_0(x)(\rho_0 * \chi_{\{|x|<1\}}\frac{Z}{|x|})(x)dx + \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^3} \rho_0(x)(\rho_0 * \chi_{\{|x|>1\}}\frac{Z}{|x|})(x)dx \\
&= \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^3} \rho_0(x)(\rho_0 * \frac{Z}{|x|})(x)dx = D_0(\rho_0,\ \rho_0).
\end{aligned} \tag{34}
$$

([5, Section9. 8]) にあるように $\alpha = 0$ でも補題 4.16(2) は成り立ち, $D_0(\rho_n,\ \rho_0)^2 \leq D_0(\rho_0,\ \rho_0)D_0(\rho_n,\ \rho_n)$ だが, $n \to \infty$ とすれば, 式 (34) より,

$$
D_0(\rho_0,\ \rho_0)^2 \leq D_0(\rho_0,\ \rho_0)\liminf_{n\to\infty} D_0(\rho_n,\ \rho_n).
$$

これより,

$$
\liminf_{n\to\infty}\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \frac{\rho_n(x)\rho_n(y)}{|x-y|}dxdy \geq \int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} \frac{\rho_0(x)\rho_0(y)}{|x-y|}dxdy. \tag{35}
$$

式（32)（33)（35) から,

$$
\begin{aligned}
&\liminf_{n\to\infty} \mathscr{E}(\rho_n) \\
\geq\ &\liminf_{n\to\infty} \frac{3}{5}\int \rho_n^{\frac{5}{3}}dx - \lim_{n\to\infty}\int \frac{\rho_n Z}{|x|}dx + \liminf_{n\to\infty}\int \frac{\rho_n(x)\rho_n(y)}{|x-y|}dxdy \\
\geq\ &\mathscr{E}(\rho_0).
\end{aligned}
$$

補題 4.19 (各点収束かつノルム収束なら強収束) $1 \leq p < \infty$ として, $\{f_n\}_{n=1}^{\infty} \subset L^p(\mathbb{R}^3)$, $f \in L^p(\mathbb{R}^3)$ のとき,

$n \to \infty$ のとき各点収束 $f_n(x) \to f(x)\,(a.e.\,x \in \mathbb{R}^3)$ とノルム収束 $||f_n||_{L^p(\mathbb{R}^3)} \to ||f||_{L^p(\mathbb{R}^3)}$ が両方成立するならば, 強収束 $||f_n - f||_{L^p(\mathbb{R}^3)} \to 0$ も成立する.

(証明) 関数 $y = x^p$ $(p \geq 1)$ の凸性から $\frac{|f(x)|^p + |f_n|^p}{2} \geq (\frac{|f(x)|+|f_n(x)|}{2})^p \geq (\frac{|f(x)-f_n(x)|}{2})^p$ なので,

$$
2^{p-1}(|f(x)|^p + |f_n(x)|^p) - |f(x) - f_n(x)|^p \geq 0.
$$

非負値なのでファトウの補題を適用し, 仮定より各点収束するので,

$$
\begin{aligned}
&\liminf_{n\to\infty}\int \{2^{p-1}(|f(x)|^p + |f_n(x)|^p) - |f(x) - f_n(x)|^p\}dx \\
&\geq \int \liminf_{n\to\infty}\{2^{p-1}(|f(x)|^p + |f_n(x)|^p) - |f(x) - f_n(x)|^p\}dx \\
&= 2^p\int |f(x)|^p dx.
\end{aligned} \tag{36}
$$

一般に次が成り立つ.

$$\liminf_{n\to\infty}(a_n - b_n) \leq \limsup_{n\to\infty} a_n + \liminf_{n\to\infty}(-b_n) = \limsup_{n\to\infty} a_n - \limsup_{n\to\infty} b_n.$$

これを式 (36) の左辺に適用し, 仮定よりノルム収束するので,

$$\begin{aligned}
&\liminf_{n\to\infty} \int \{2^{p-1}(|f(x)|^p + |f_n(x)|^p) - |f(x) - f_n(x)|^p\} dx \\
&\leq \limsup_{n\to\infty} \int 2^{p-1}(|f(x)|^p + |f_n(x)|^p) dx - \limsup_{n\to\infty} \int |f(x) - f_n(x)|^p dx \\
&= 2^p \int |f(x)|^p dx - \limsup_{n\to\infty} \int |f(x) - f_n(x)|^p dx. \qquad (37)
\end{aligned}$$

式 (36), (37) から,

$$\limsup_{n\to\infty} \int |f(x) - f_n(x)|^p dx \leq 0.$$

これは強収束 $||f_n - f||_{L^p(\mathbb{R}^3)} \to 0$ の成立を意味する.

補題 4.20 $C_c^\infty(\mathbb{R}^3\backslash\{0\})$ は $H^1(\mathbb{R}^3)$ で稠密である.

(証明) $C_c^\infty(\mathbb{R}^3)$ が $H^1(\mathbb{R}^3)$ で稠密であることはよく知られている. ([4, Theorem 9. 2]). これをもとに証明する. 従って次が成り立つ.

$$u \in H^1(\mathbb{R}^3) \text{ ならば } \exists \{u_n\}_{n=1}^\infty \subset C_c^\infty(\mathbb{R}^3)\ s.\,t.\ u_n \to u \text{ in } H^1(\mathbb{R}^3).$$

一方, 定数 $k > 0$ があって, 次の条件を満たす $\eta(x)$, $\eta_n(x)$ がある.

$$\eta \in C^\infty(\mathbb{R}^3),\ 0 \leq \eta(x) \leq 1,\ \eta(x) = \begin{cases} 0 & (|x| \leq 1) \\ 1 & (|x| \geq 2) \end{cases},\ |\nabla\eta(x)| \leq k,\ \eta_n(x) = \eta(nx).$$

$\{\eta_n u_n\}_{n=1}^\infty \subset C_c^\infty(\mathbb{R}^3\backslash\{0\})$ なので $\eta_n u_n \to u$ in $H^1(\mathbb{R}^3)$ を示せばよい. まず,

$$\begin{aligned}
||\eta_n u_n - u||_{H^1(\mathbb{R}^3)} &\leq ||\eta_n u_n - \eta_n u||_{H^1(\mathbb{R}^3)} + ||\eta_n u - u||_{H^1(\mathbb{R}^3)} \\
&\leq ||\eta_n u_n - \eta_n u||_{L^2(\mathbb{R}^3)} + \sum_{i=1}^{3} ||\frac{\partial(\eta_n u_n - \eta_n u)}{\partial x_i}||_{L^2(\mathbb{R}^3)} \\
&\qquad + ||\eta_n u - u||_{L^2(\mathbb{R}^3)} + \sum_{i=1}^{3} ||\frac{\partial(\eta_n u - u)}{\partial x_i}||_{L^2(\mathbb{R}^3)}
\end{aligned}$$

あとは $n \to \infty$ のとき, 右辺の各項が 0 に収束することを示せばよい. 第 1 項は,

$$||\eta_n u_n - \eta_n u||_{L^2(\mathbb{R}^3)}^2 \leq ||u_n - u||_{L^2(\mathbb{R}^3)}^2 \leq ||u_n - u||_{H^1(\mathbb{R}^3)}^2 \to 0\ (n \to \infty).$$

第 2 項は, 分割した後半の項でソボレフの埋込定理から $(u_n - u) \in H^1(\mathbb{R}^3) \subset L^6(\mathbb{R}^3)$ に注意して, 最後はルベーグ収束定理を使って, 定数を C として,

$$
\begin{aligned}
&||\frac{\partial(\eta_n u_n - \eta_n u)}{\partial x_i}||^2_{L^2(\mathbb{R}^3)} = \int |\eta_n \frac{\partial(u_n - u)}{\partial x_i}|^2 dx + \int |\frac{\partial \eta_n}{\partial x_i}(u_n - u)|^2 dx \\
&\leq ||\frac{\partial(u_n - u)}{\partial x_i}||^2_{L^2(\mathbb{R}^3)} + k^2 n^2 \int_{\frac{1}{n} \leq |x| \leq \frac{2}{n}} |u_n - u|^2 dx \\
&\leq ||u_n - u||^2_{H^1(\mathbb{R}^3)} + k^2 n^2 (\int_{|x| \leq \frac{2}{n}} |u_n - u|^6 dx)^{\frac{1}{3}} (|B(\frac{2}{n})|)^{\frac{2}{3}} \\
&\leq ||u_n - u||^2_{H^1(\mathbb{R}^3)} + C(\int \chi_{B(\frac{2}{n})} |u_n - u|^6 dx)^{\frac{1}{3}} \to 0 \ (n \to \infty).
\end{aligned}
$$

第 3 項は, ルベーグ収束定理で,

$$
||\eta_n u - u||^2_{L^2(\mathbb{R}^3)} = \int |(\eta_n u - u)|^2 dx \to 0 \ (n \to \infty).
$$

第 4 項は, 分割した前半の項ではルベーグ収束定理を使って, 分割した後半の項ではソボレフの埋込定理から $(u_n - u) \in H^1(\mathbb{R}^3) \subset L^6(\mathbb{R}^3)$ に注意して, 最後はルベーグ収束定理で, 定数を C として,

$$
\begin{aligned}
&||\frac{\partial(\eta_n u - u)}{\partial x_i}||^2_{L^2(\mathbb{R}^3)} = \int |(\eta_n - 1)\frac{\partial u}{\partial x_i}|^2 dx + \int |\frac{\partial \eta_n}{\partial x_i} u|^2 dx, \\
&\int |(\eta_n - 1)\frac{\partial u}{\partial x_i}|^2 dx \to 0 \ (n \to \infty), \\
&\int |\frac{\partial \eta_n}{\partial x_i} u|^2 dx \leq k^2 n^2 \int_{\frac{1}{n} \leq |x| \leq \frac{2}{n}} |u|^2 dx \leq k^2 n^2 (\int_{|x| \leq \frac{2}{n}} |u|^6 dx)^{\frac{1}{3}} (|B(\frac{2}{n})|)^{\frac{2}{3}} \\
&\leq C(\int \chi_{B(\frac{2}{n})} |u|^6 dx)^{\frac{1}{3}} \to 0 \ (n \to \infty).
\end{aligned}
$$

5 定理 2.1(YTF 模型のミニマイザーの一意存在と基本的性質) の証明.

5.1 定理 2.1(1) の証明.

(証明) step1. E_α は下限を持つことを示す. $\forall \rho \in \mathscr{T}$ で, ヘルダーの不等式より,

$$
\begin{aligned}
\mathscr{E}_\alpha(\rho) \quad &\geq \quad \frac{3}{5}\int \rho^{\frac{5}{3}} dx - \int \frac{\rho Z e^{-\alpha|x|}}{|x|} dx \\
&\geq \quad \frac{3}{5}\int \rho^{\frac{5}{3}} dx - (\int (\frac{Z e^{-\alpha|x|}}{|x|})^{\frac{5}{2}} dx)^{\frac{2}{5}} (\int \rho^{\frac{5}{3}} dx)^{\frac{3}{5}}.
\end{aligned}
$$

右辺第 2 項で $y = \alpha x$ とし

$$
\int (\frac{Z e^{-\alpha|x|}}{|x|})^{\frac{5}{2}} dx = \frac{Z^{\frac{5}{2}}}{\alpha^{\frac{1}{2}}} \int \frac{e^{-\frac{5}{2}|y|}}{|y|^{\frac{5}{2}}} dy =: \frac{Z^{\frac{5}{2}}}{\alpha^{\frac{1}{2}}} C'
$$

となる. これを使い, 次にヤングの不等式を使い,

$$\begin{aligned}\mathscr{E}_\alpha(\rho) &\geq \frac{3}{5}\int \rho^{\frac{5}{3}}dx - (C'\frac{Z^{\frac{5}{2}}}{\alpha^{\frac{1}{2}}})^{\frac{2}{5}}(\int \rho^{\frac{5}{3}}dx)^{\frac{3}{5}} \\ &\geq \frac{3}{5}\int \rho^{\frac{5}{3}}dx - \{\frac{3}{5}\epsilon^{\frac{5}{3}}(\int \rho^{\frac{5}{3}}dx) + \frac{2}{5}(C'\frac{Z^{\frac{5}{2}}}{\epsilon^{\frac{5}{2}}\alpha^{\frac{1}{2}}})\}.\end{aligned}$$

$\epsilon^{\frac{5}{3}} = \frac{1}{2}$ とし,

$$\mathscr{E}_\alpha(\rho) \geq \frac{3}{10}\int \rho^{\frac{5}{3}}dx - C\frac{Z^{\frac{5}{2}}}{\alpha^{\frac{1}{2}}} \geq -C\frac{Z^{\frac{5}{2}}}{\alpha^{\frac{1}{2}}}, \quad \forall\rho \in \mathscr{T}. \tag{38}$$

ここで C は Z, α によらない定数. これより $E_\alpha \geq -C\frac{Z^{\frac{5}{2}}}{\alpha^{\frac{1}{2}}}$.

step2.

$step1$ より $\mathscr{E}_\alpha(\rho_1) \geq \mathscr{E}_\alpha(\rho_2) \geq \cdots \to E_\alpha$ となる最小化列 $\{\rho_n\} \subset \mathscr{T}$ がある. $\{\rho_n\}$ は $step1$ より $\mathscr{E}_\alpha(\rho_1) \geq \mathscr{E}_\alpha(\rho_n) \geq \frac{3}{10}\int \rho_n^{\frac{5}{3}}dx - C\frac{Z^{\frac{5}{2}}}{\alpha^{\frac{1}{2}}}$ なので, $L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3)$ 有界列である. これより部分列（部分列も $\{\rho_n\}$ で表記する）$\{\rho_n\}$ と $\rho_0 \in L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3)$ が存在し $\rho_n \rightharpoonup \rho_0$ と $L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3)$ で弱収束する. これより補題 4.18(1) の仮定を満たすので, $\rho_0 \in \mathscr{T}$ かつ $E_\alpha = \lim_{n\to\infty}\mathscr{E}_\alpha(\rho_n) \geq \mathscr{E}(\rho_0)$. 逆に, $\rho_0 \in \mathscr{T}$ より $\mathscr{E}(\rho_0) \geq E_\alpha$. よって ρ_0 は E_α のミニマイザーである.

step3. ミニマイザーの一意性と $\rho_\alpha(x)$ が $|x|$ の関数であることを背理法で示す.

一意性を示す. ρ について $\int \rho^{\frac{5}{3}}dx$ は狭義凸関数, $\int \frac{\rho(x)Ze^{-\alpha|x|}}{|x|}dx$ は広義凸関数 ([6, 定理 2. 6] 参照). また補題 4.16(3) から $D_\alpha(\rho, \rho)$ は狭義凸関数. これらから $\mathscr{E}_\alpha(\rho)$ は狭義凸性を持つ. ミニマイザーが ρ_0 と σ_0 と 2 つあれば, $\frac{\rho_0+\sigma_0}{2} \in \mathscr{T}$ かつ狭義凸性より $\frac{\mathscr{E}_\alpha(\rho_0)+\mathscr{E}_\alpha(\sigma_0)}{2} > \mathscr{E}_\alpha(\frac{\rho_0+\sigma_0}{2})$ となり矛盾.

次に $\rho_\alpha(x)$ は $|x|$ の関数である. もしそうでないと, エネルギー汎関数の回転対称性から, $\rho_\alpha(x)$ を直交変換したものもミニマイザーとなり, 一意性と矛盾する.

5.2 定理 2.1(2) の証明.

次の 3 つの補題 5. 1, 5. 2, 5. 3 を使って定理 2.1(2) が示される.

補題 5.1 E_α のミニマイザーを ρ_α とし,

$$(\rho_\alpha(x))^{\frac{2}{3}} - \frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|} + \int_{\mathbb{R}^3}\rho_\alpha(y)\frac{e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dy)\rho_\alpha(x) = 0 \qquad (a.\ e.\ x \in \mathbb{R}^3).$$

(証明) $\phi \in C_c^\infty(\mathbb{R}^3)$, $s \in (-\epsilon, \epsilon)$ とし, $\epsilon > 0$ が十分小さければ, $\rho_\alpha(1+s\phi) \in \mathscr{T}$ なので, $\frac{d}{ds}\mathscr{E}(\rho_\alpha(1+s\phi))|_{s=0} = 0$ より,

$$\int (\rho_\alpha(x))^{\frac{2}{3}} - \frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|} + \int_{\mathbb{R}^3}\rho_\alpha(y)\frac{e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dy)\rho_\alpha(x)\phi(x)dx = 0 \qquad \forall\phi \in C_c^\infty(\mathbb{R}^3).$$

これより,

$$(\rho_\alpha(x)^{\frac{2}{3}} - \frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|} + \int_{\mathbb{R}^3} \rho_\alpha(y)\frac{e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dy)\rho_\alpha(x) = 0 \qquad (a.\ e.\ x \in \mathbb{R}^3).$$

補題 5.2 E_α のミニマイザーを ρ_α とし,

$$\rho_\alpha(x)^{\frac{2}{3}} - \frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|} + \int_{\mathbb{R}^3} \rho_\alpha(y)\frac{e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dy \geq 0 \qquad (a.\ e.\ x \in \mathbb{R}^3).$$

(証明) $f \in L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3)$, $f \geq 0$, $t > 0$ とすれば, $\rho_\alpha + tf \in \mathscr{T}$ より, $\frac{d}{ds}\mathscr{E}(\rho_\alpha + tf)|_{t=0} \geq 0$ なので,

$$\int (\rho_\alpha(x)^{\frac{2}{3}} - \frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|} + \int_{\mathbb{R}^3} \rho_\alpha(y)\frac{e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dy)f(x)dx \geq 0,$$
$$\forall f \in L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3) \text{ かつ } f \geq 0. \tag{39}$$

$A := \{x|\rho_\alpha(x)^{\frac{2}{3}} - \frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|} + \int_{\mathbb{R}^3} \rho_\alpha(y)\frac{e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|} < 0\}$ とおくと, $|A| = 0$. なぜなら $|A| > 0$ とすると, f として特性関数 χ_A がとれて $\int(\rho_\alpha(x)^{\frac{2}{3}} - \frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|} + \int_{\mathbb{R}^3} \rho_\alpha(y)\frac{e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dy)\chi_A dx < 0$ となり, (39) と矛盾するから. これより,

$$\rho_\alpha(x)^{\frac{2}{3}} - \frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|} + \int_{\mathbb{R}^3} \rho_\alpha(y)\frac{e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dy \geq 0 \qquad (a.\ e.\ x \in \mathbb{R}^3).$$

補題 5.3 E_α のミニマイザーを ρ_α とし,

$$V_\alpha(x) := \frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|} - \int_{\mathbb{R}^3} \rho_\alpha(y)\frac{e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dy \geq 0 \qquad (x \in \mathbb{R}^3 \setminus \{0\}).$$

(証明) $A := \{x \in \mathbb{R}^3 \setminus \{0\}|V_\alpha(x) < 0\}$ が空集合であることを示せばよい. 補題 4.17 より, $V_\alpha \in C(\mathbb{R}^3 \setminus \{0\})$ なので

$$A \text{ は開集合.} \tag{40}$$

補題 4.17 より,

$$V_\alpha(x) \to 0 \qquad (|x| \to \infty). \tag{41}$$

また補題 4.17 の証明冒頭でわかるように $\int \rho_\alpha(y)\frac{e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dy$ は有界なので, $x = 0$ のある近傍で $V_\alpha > 0$. これより $\mathrm{dist}\{0,\ A\} > 0$. これより $\bar{A} \subset \mathbb{R}^3 \setminus \{0\}$ なので,

$$V_\alpha(x) \in C(\bar{A}). \tag{42}$$

A 上では $V_\alpha = \frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|} - \int_{\mathbb{R}^3} \rho_\alpha(y)\frac{e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dy < 0$ なので, A 上では $\rho_\alpha^{\frac{2}{3}} - \frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|} + \int_{\mathbb{R}^3} \rho_\alpha(y)\frac{e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dy > 0$. これと補題 5.1 から, A 上では $\rho_\alpha = 0$ となる. このことと補題 4.17 から,

$$-\Delta(-V_\alpha) = \alpha^2 V_\alpha + 4\pi\rho_\alpha = \alpha^2 V_\alpha < 0 \text{ in } \mathcal{D}'(A). \tag{43}$$

最大値原理の系 4.4 の仮定を, (40), (41), (42), (43) が満たすので,

$$\sup_{\bar{A}}(-V_\alpha) \le \sup_{\partial A}(-V_\alpha)^+. \tag{44}$$

$V_\alpha(x)$ の連続性, A が開集合, $\mathrm{dist}\{0,\ A\} > 0$ から, $V_\alpha(x) = 0$ *on* ∂A なので,

$$\sup_{\bar{A}}(-V_\alpha) \le 0. \tag{45}$$

これは A が空集合を意味する.

定理 2.1(2) の証明.. step1. オイラーラグランジュ方程式を導く.

$\rho_\alpha \ne 0$ の場合. 補題 5.1 から,

$$\rho_\alpha(x)^{\frac{2}{3}} - \frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|} + \int_{\mathbb{R}^3} \rho_\alpha(y)\frac{e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dy = 0 \qquad (a.\ e.\ x \in \mathbb{R}^3 \cap \{x|\rho_\alpha(x) \ne 0\}).$$

$\rho_\alpha = 0$ の場合. 補題 5.2, 5.3 から,

$$\rho_\alpha(x)^{\frac{2}{3}} - \frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|} + \int_{\mathbb{R}^3} \rho_\alpha(y)\frac{e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dy = 0 \qquad (a.\ e.\ x \in \mathbb{R}^3 \cap \{x|\rho_\alpha(x) = 0\}).$$

補題 4.17 より $\frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|} - \int_{\mathbb{R}^3} \rho_\alpha(y)\frac{e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dy$ は $\mathbb{R}^3 \setminus \{0\}$ で連続なので, （必要なら $\rho_\alpha(x)$ の測度 0 の部分で値をとりなおして）

$$\rho_\alpha(x)^{\frac{2}{3}} - \frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|} + \int_{\mathbb{R}^3} \rho_\alpha(y)\frac{e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dy = 0 \qquad (\mathbb{R}^3 \setminus \{0\}). \tag{46}$$

step2. $Z \ge \int \rho_\alpha(x)dx$ を導く. 式（46) から,

$$\rho_\alpha^{\frac{2}{3}}(x) = \frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|} - \int \frac{\rho_\alpha(y)e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dy \ge 0.$$

よって,

$$Z \ge |x|e^{\alpha|x|}(\int \frac{\rho_\alpha(y)e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dy).$$

補題 4.13 より,

$$\begin{aligned} Z &\ge |x|e^{\alpha|x|}(\int_{|y|\le|x|} \frac{\rho_\alpha(y)\sinh(\alpha|y|)}{\alpha|x||y|e^{\alpha|x|}}dy + \int_{|y|\ge|x|} \frac{\rho_\alpha(y)\sinh(\alpha|x|)}{\alpha|x||y|e^{\alpha|y|}}dy) \\ &\ge \int_{|y|\le|x|} \frac{\rho_\alpha(y)\sinh(\alpha|y|)}{\alpha|y|}dy. \end{aligned}$$

$|x| \to \infty$ で,

$$Z \ \ \ge \ \ \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\rho_\alpha(y)\sinh(\alpha|y|)}{\alpha|y|}dy \ge \int_{\mathbb{R}^3} \rho_\alpha(y)dy = \lambda_\alpha.$$

5.3　定理 2.1(3) の証明.

(証明) step1. 補題 4.17 より $V_\alpha := \frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|} - \int \frac{\rho(y)e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dy \in C(\mathbb{R}^3\backslash\{0\})$. $\rho_\alpha = V_\alpha^{\frac{3}{2}}$ より, $\rho_\alpha \in C(\mathbb{R}^3\backslash\{0\})$. ρ_α, V_α は球対称なので $\rho_\alpha(r)$, $V_\alpha(r)$ とも書くことにする. すると $\rho_\alpha(r)$, $V_\alpha(r) \in C((0,\ \infty))$. 定理 2.1(2) より $\rho_\alpha \in L^1(\mathbb{R}^3)$ なので $r^2\rho_\alpha(r) \in L^1((0,\ \infty))$.

step2. 補題 4.13 より,

$$
\begin{aligned}
V_\alpha(r) = \frac{Ze^{-\alpha r}}{r} - \frac{e^{-\alpha r}}{r}\int_0^r \frac{4\pi s^2\rho(s)\sinh(\alpha s)}{\alpha s}ds \\
-\frac{\sinh(\alpha r)}{\alpha r}\int_r^\infty 4\pi s^2\rho(s)\frac{e^{-\alpha s}}{s}ds. \qquad (47)
\end{aligned}
$$

一般に $n \in \mathbb{Z}_+$, $f \in L^1((0,\ \infty))$, $f \in C^n((0,\ \infty))$ なら $\int_0^x f(y)dy$, $\int_x^\infty f(y)dy \in C^{n+1}((0,\ \infty))$ なので, $step1$ と (47) から $V_\alpha(r) \in C^1((0,\ \infty))$. $\rho_\alpha = V_\alpha^{\frac{3}{2}}$ より $\rho_\alpha(r) \in C^1((0,\ \infty))$. この操作を繰り返し, $V_\alpha(r) \in C^\infty((0,\ \infty))$, $\rho_\alpha(r) \in C^\infty((0,\ \infty))$. よって $V_\alpha \in C^\infty(\mathbb{R}^3\backslash\{0\})$, $\rho_\alpha \in C^\infty(\mathbb{R}^3\backslash\{0\})$

5.4　定理 2.1(4) の証明.

(証明) step1. $V_\alpha(x) > 0$ かつ $\rho_\alpha(x) > 0 \quad (\forall x \in \mathbb{R}^3 \setminus \{0\})$ を示す.

$0 < r < R$ なる任意の r, R に対し $U_{rR} := \{x | r < |x| < R\}$ とおく. U_{rR} で $V_\alpha > 0$ を示せばよい. そうすれば $\rho_\alpha = V_\alpha^{\frac{3}{2}}$ から $\rho_\alpha > 0$ となるからである.

補題 4.17 と定理 2.1(3) より,

$$\text{有界連結開集合 } U_{rR}\text{で, } V_\alpha \in C^2(U_{rR}) \cap C(\bar{U}_{rR}). \qquad (48)$$

補題 4.17 より

$$-\Delta(-V_\alpha) = \alpha^2 V_\alpha + 4\pi\rho_\alpha = (\alpha^2 + 4\pi V_\alpha^{\frac{1}{2}})V_\alpha.$$

$\alpha^2 + 4\pi V_\alpha^{\frac{1}{2}}$ は $\bar{U}_{rR}$ で連続なので最大値 $\gamma \geq 0$ を持つので, $-\Delta(-V_\alpha) \leq \gamma V_\alpha$ よって,

$$(-\Delta + \gamma)(-V_\alpha) \leq 0,\ \gamma \geq 0 \text{ in } U_{rR}. \qquad (49)$$

ここから背理法で $V_\alpha > 0$ in U_{rR} を示す. すでに補題 5.3 から $-V_\alpha \leq 0$ in U_{rR} なので, 結論を否定すれば $\bar{U}_{rR}$ のある内点 x_0 で $V_\alpha(x_0) = 0$ となる. よって

$$\bar{U}_{rR}\text{の内点 } x_0\text{で, 最大値 } -V_\alpha(x_0) = 0 \text{ をとる}. \qquad (50)$$

強最大値原理の補題 4.5 の仮定を (161), (162), (163) は満たすので,

$$V_\alpha(x) \equiv 0 \text{ in } \bar{U}_{rR}. \qquad (51)$$

ところがこれは $\rho_\alpha(x) \equiv 0$ in $\mathbb{R}^3 \setminus \{0\}$ を意味する. つまりミニマイザー $\rho_\alpha \equiv 0$ となり, $E_\alpha = 0$ となる. しかし明らかに $E_\alpha < 0$ なので矛盾する.($E_\alpha < 0$ なのは, たとえば $\int \frac{Z\rho_0(x)e^{-\alpha|x|}}{|x|} > 0$ となる $\rho_0(x)$ に対して $\mathscr{E}_\alpha(\lambda\rho_0(x))$ を考えれば, $\lambda > 0$ を十分小さくとれば $\mathscr{E}_\alpha(\lambda\rho_0(x)) < 0$ となる.)

step2. $t \leq 1$, $r \in (0,\ \infty)$ で $r^t V_\alpha(r),\ r^{\frac{3}{2}t}\rho_\alpha(r)$ は狭義減少関数であることを示す.

式 (47) を代入し計算し, 再び式 (47) を使い $V_\alpha(r)$ に戻せば,

$$
\begin{aligned}
&\frac{\partial}{\partial r}(rV_\alpha(r)) \\
&= \frac{\partial}{\partial r}\Big(Ze^{-\alpha r} - e^{-\alpha r}\int_0^r \frac{4\pi s^2\rho(s)\sinh(\alpha s)}{\alpha s}ds \\
&\qquad\qquad - \frac{\sinh(\alpha r)}{\alpha}\int_r^\infty 4\pi s^2\rho(s)\frac{e^{-\alpha s}}{s}ds\Big) \\
&= -\alpha r\Big(\frac{Ze^{-\alpha r}}{r} - \frac{e^{-\alpha r}}{r}\int_0^r \frac{4\pi s^2\rho(s)\sinh(\alpha s)}{\alpha s}ds\Big) \\
&\qquad\qquad - \cosh(\alpha r)\int_r^\infty 4\pi s^2\rho(s)\frac{e^{-\alpha s}}{s}ds \\
&= -\alpha r\Big(V_\alpha(r) + \frac{\sinh(\alpha r)}{\alpha r}\int_r^\infty 4\pi s^2\rho(s)\frac{e^{-\alpha s}}{s}ds\Big) \\
&\qquad\qquad - \cosh(\alpha r)\int_r^\infty 4\pi s^2\rho(s)\frac{e^{-\alpha s}}{s}ds \\
&< 0\ (0 < r < \infty).
\end{aligned}
$$

これより $t \leq 1$ なら $r^t V_\alpha$ は狭義減少関数. $r^{\frac{3}{2}t}\rho_\alpha(r) = (r^t V_\alpha)^{\frac{3}{2}}(r)$ も狭義減少関数.

step3. $t \leq 1$, $r \in (0,\ \infty)$ で $r^t V_\alpha(r),\ r^{\frac{3}{2}t}\rho_\alpha(r)$ は狭義凸関数であることを示す.

補題 4.16 と, $V_\alpha,\ \rho_\alpha \in C^\infty(\mathbb{R}^3\backslash\{0\})$ から, $(\Delta - \alpha^2)V_\alpha(r) = 4\pi\rho_\alpha(r)$ in $\mathbb{R}^3\backslash\{0\}$. また V_α は球対称関数より, $\Delta V_\alpha(r) = (\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2\partial}{r\partial r})V_\alpha(r)$ なので,

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial^2}{\partial r^2}(rV_\alpha(r)) &= r\frac{\partial^2 V_\alpha(r)}{\partial r^2} + 2\frac{\partial V_\alpha(r)}{\partial r} \\
&= r(-\frac{2\partial V_\alpha(r)}{r\partial r} + \alpha^2 V_\alpha + 4\pi\rho_\alpha) + 2\frac{\partial V_\alpha(r)}{\partial r} \\
&= \alpha^2 rV_\alpha + 4\pi r\rho_\alpha > 0.
\end{aligned} \tag{52}
$$

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r^t V_\alpha(r)) &= \frac{\partial^2}{\partial r^2}\{r^{t-1}(rV_\alpha(r))\} \\
&= r^{t-1}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(rV_\alpha(r)) + 2(t-1)r^{t-2}\frac{\partial}{\partial r}(rV_\alpha(r)) \\
&\qquad +(t-1)(t-2)r^{t-3}(rV_\alpha(r)).
\end{aligned}
$$

(52) の $\frac{\partial^2}{\partial r^2}(rV_\alpha(r)) > 0$ と $step2$ の $\frac{\partial}{\partial r}(rV_\alpha(r)) < 0$ から $t \leq 1$ ならば,

$$
\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r^t V_\alpha(r)) > 0.
$$

よって $t \le 1$ ならば, $r^t V_\alpha(r)$ は狭義凸関数.

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r^t V_\alpha(r))^{\frac{3}{2}} = \frac{3}{4}(r^t V_\alpha(r))^{-\frac{1}{2}}(\frac{\partial}{\partial r}(r^t V_\alpha(r)))^2 + \frac{3}{2}(r^t V_\alpha(r))^{\frac{1}{2}}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r^t V_\alpha(r)) > 0.$$

よって $r^{\frac{3}{2}t}\rho(r) = (r^t V_\alpha)^{\frac{3}{2}}(r)$ も狭義凸関数.

step4. $\alpha = 0$ での $r^t V_0(r)$, $r^{\frac{3}{2}t}\rho_0(r)$ が狭義減少狭義凸関数であることを示しておく. $\alpha = 0$ では,

$$V_0(r) = \frac{Z}{r} - \frac{1}{r}\int_0^r 4\pi s^2\rho_0(s)ds - \int_r^\infty \frac{4\pi s^2\rho_0(s)}{s}ds.$$

よって,

$$\begin{aligned}&\frac{\partial}{\partial r}(rV_0(r)) = \frac{\partial}{\partial r}(Z - \int_0^r 4\pi s^2\rho_0(s)ds - r\int_r^\infty \frac{4\pi s^2\rho(s)}{s}ds)\\ &= -\int_r^\infty \frac{4\pi s^2\rho(s)}{s}ds < 0 \ (0 < r < \infty).\end{aligned}$$

これより $t \le 1$ なら $r^t V_0$ は狭義減少関数. $r^{\frac{3}{2}t}\rho_0(r) = (r^t V_0)^{\frac{3}{2}}(r)$ も狭義減少関数.

$\Delta V_\alpha(r) = 4\pi\rho_0(r)$ in $\mathbb{R}^3\backslash\{0\}$. また $\Delta V_\alpha(r) = (\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2\partial}{r\partial r})V_\alpha(r)$ なので,

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(rV_0(r)) &= r\frac{\partial^2 V_0(r)}{\partial r^2} + 2\frac{\partial V_0(r)}{\partial r} = r(-\frac{2\partial V_0(r)}{r\partial r} + 4\pi\rho_0) + 2\frac{\partial V_0(r)}{\partial r}\\ &= 4\pi r\rho_0 > 0.\end{aligned}$$

$t \le 1$ で $r^t V_0(r)$, $r^{\frac{3}{2}t}\rho_0(r)$ が狭義凸関数であることを示すのは $step3$ と同様である.

6 定理 2.2(YTF 模型の L^1 ノルム制限付き変分問題の基本定理) の証明.

6.1 定理 2.2(1)(2) の証明.

3 つの補題 6.1, 6.2, 6.3 を証明し, これらを使い, 定理 2.2(1), 定理 2.2(2) を証明する. 補題 6.4 を証明し, これを使い定理 2.2(3) を証明する.

補題 6.1 各 $\lambda \in [0, \infty)$ で $E_{\alpha\le}(\lambda)$ はただ 1 つのミニマイザー $\rho^*_{\alpha,\lambda}$ を持つ.

(証明)（$\alpha = 0$ は [5, Section11. 12] 参照）**step1.** 定理 2.1(1) より $E_{\alpha\le}(\lambda) \ge E_\alpha > -\infty$ から, $\mathscr{E}_\alpha(\rho_1) \ge \mathscr{E}_\alpha(\rho_2) \ge \cdots \to E_{\alpha\le}(\lambda)$ となる最小化列 $\{\rho_n\} \subset \mathscr{T}_\lambda \subset \mathscr{T}$ がある. $\{\rho_n\}$ は定理 2.1(1) の式 (38) より $\mathscr{E}_\alpha(\rho_1) \ge \mathscr{E}_\alpha(\rho_n) \ge \frac{3}{10}\int\rho_n^{\frac{5}{3}} - C\frac{Z^{\frac{5}{2}}}{\alpha^{\frac{1}{2}}}$ なので, $L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3)$ 有界列である. これより部分列（部分列も $\{\rho_n\}$ で表記する）

$\{\rho_n\}$ と $\rho_0 \in L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3)$ が存在し $\rho_n \rightharpoonup \rho_0$ と $L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3)$ で弱収束する. 以上で補題 4.18(1) の仮定を満たすので, $\rho_0 \in \mathscr{T}$ かつ $E_{\alpha\leq}(\lambda) = \lim_{n\to\infty} \mathscr{E}_\alpha(\rho_n) \geq \mathscr{E}_\alpha(\rho_0)$.

次に $\int \rho_0 \leq \lambda$ を背理法で示す. $\int \rho_0 > \lambda$ と仮定すると, 有界領域 A で, $\int \rho_0 \chi_A > \lambda$ となる $\chi_A \in L^{\frac{5}{2}}$ が存在する. 一方, $\lambda \geq \int \rho_n \geq \int \chi_A \rho_n \to \int \chi_A \rho_0$ より $\lambda \geq \int \rho_0$ となる. この 2 つが矛盾するので $\int \rho_0 \leq \lambda$. これと $\rho_0 \in \mathscr{T}$ より $\rho_0 \in \mathscr{T}_{\leq\lambda}$. $\rho_0 \in \mathscr{T}_{\leq\lambda}$ より $\mathscr{E}(\rho_0) \geq E_{\alpha\leq}(\lambda)$.

以上 $\rho_0 \in \mathscr{T}_{\leq\lambda}$ と $E_{\alpha\leq}(\lambda) = \lim_{n\to\infty} \mathscr{E}_\alpha(\rho_n) \geq \mathscr{E}_\alpha(\rho_0)$ と $\mathscr{E}(\rho_0) \geq E_{\alpha\leq}(\lambda)$ から ρ_0 は $E_{\alpha\leq}(\lambda)$ のミニマイザー $\rho^*_{\alpha,\,\lambda}(x)$ である.

step2. ミニマイザーの一意性と $\rho^*_{\alpha,\,\lambda}(x)$ が $|x|$ の関数であることをを背理法で示す.

$\mathscr{E}_\alpha(\rho)$ は狭義凸性を持つので, ミニマイザーが ρ_0 と σ_0 と 2 つあれば, $\frac{\rho_0+\sigma_0}{2} \in \mathscr{T}_\lambda$ かつ狭義凸性より $\frac{\mathscr{E}(\rho_0)+\mathscr{E}(\sigma_0)}{2} > \mathscr{E}(\frac{\rho_0+\sigma_0}{2})$ となり矛盾.

次に $\rho_\alpha(x)$ は $|x|$ の関数である. もしそうでないと, エネルギー汎関数の回転対称性から, $\rho_\alpha(x)$ を直交変換したものもミニマイザーとなり, 一意性と矛盾する.

補題 6.2 $E_{\alpha\leq}(\lambda) = E_\alpha(\lambda)$.

(証明) step1. $0 < \alpha < \infty$ として証明する（$\alpha = 0$ は [5, Section11. 12] 参照）$E_{\alpha\leq}(\lambda) \leq E_\alpha(\lambda)$ は自明なので, $E_{\alpha\leq}(\lambda) \geq E_\alpha(\lambda)$ を示す. $\forall\epsilon > 0$, $\forall\rho \in \mathscr{T}_\lambda$ に対し, $|\mathscr{E}_\alpha(\rho) - \mathscr{E}_\alpha(\rho')| < \epsilon$ となる $\rho' \in \mathscr{T}_{\partial\lambda}$ が存在することを示せばよい. $\int \rho = \lambda$ の場合は ρ' として ρ をとればよいので, $\mu := \int \rho < \lambda$ の場合で示せばよい. $g \geq 0$ かつ $g \in L^1(\mathbb{R}^3) \cap L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3)$ かつ $\int g = \lambda - \mu$ となる g がとれる. $t > 0$ として $\rho_t(x) := \rho(x) + t^3 g(tx)$ とおくと $\rho_t \in \mathscr{T}_{\partial\lambda}$ となる. $1 < r \leq \frac{5}{3}$ として,

$$||\rho_t - \rho||_r^r = \int (t^3 g(tx))^r dx = t^{3r-3} \int g(y)dy \to 0(t \to 0). \tag{53}$$

step2.

$\rho_t \in \mathscr{T}_{\partial\lambda}$ なので, 以下で $|\mathscr{E}(\rho_t) - \mathscr{E}(\rho)| \to 0(t \to 0)$ を示せば証明が終わる.

$$\begin{aligned} & |\mathscr{E}(\rho_t) - \mathscr{E}(\rho)| \\ \leq\ & |\frac{3}{5}\int (\rho_t^{\frac{5}{3}} - \rho^{\frac{5}{3}})dx| + |\int (\rho_t - \rho)\frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|}dx| + |D_\alpha(\rho_t,\ \rho_t) - D_\alpha(\rho,\ \rho)|. \end{aligned} \tag{54}$$

右辺各項が 0 に収束を示す. 式（53）より,

$$|(\int \rho_t^{\frac{5}{3}} dx)^{\frac{3}{5}} - (\int \rho^{\frac{5}{3}} dx)^{\frac{3}{5}}| = |\ ||\rho_t||_{\frac{5}{3}} - ||\rho_t||_{\frac{5}{3}}| \leq ||\rho_t - \rho||_{\frac{5}{3}} \to 0(t \to 0). \tag{55}$$

ヘルダーの不等式と式（53）より,

$$|\int (\rho_t - \rho)\frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|}dx| \leq ||\rho_t - \rho||_{\frac{5}{3}} ||\frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|}||_{\frac{5}{2}} \to 0(t \to 0). \tag{56}$$

三角不等式, 補題 4.14, 収束列の有界性より,

$$\begin{aligned} & |D_\alpha(\rho_t,\ \rho_t) - D_\alpha(\rho,\ \rho)| \\ \le\ & |D_\alpha(\rho_t,\ \rho_t - \rho)| + |D_\alpha(\rho_t - \rho,\ \rho)| \\ \le\ & C'||\rho_t||_{\frac{5}{3}}||\rho_t - \rho||_{\frac{5}{3}} + C'||\rho||_{\frac{5}{3}}||\rho_t - \rho||_{\frac{5}{3}} \\ \le\ & C||\rho_t - \rho||_{\frac{6}{5}} \to 0 (t \to 0). \end{aligned} \tag{57}$$

式（54）（55）（56）（57）より $|\mathscr{E}(\rho_t) - \mathscr{E}(\rho)| \to 0 (t \to 0)$.

補題 6.3 $E_\alpha(\lambda)$ は $\lambda \in [0,\ \infty)$ で広義減少関数, 広義凸関数.

(証明) step1. $E_\alpha(\lambda)$ が広義減少関数であることを示す.
$\lambda < \mu$ ならば $E_{\alpha\le}(\lambda) = \inf\{\mathscr{E}_\alpha(\rho)|\rho \in \mathscr{T}_\lambda\} \ge \inf\{\mathscr{E}_\alpha(\rho)|\rho \in \mathscr{T}_\mu\} = E_{\alpha\le}(\mu)$.
ところで補題 6.2 より $E_{\alpha\le}(\lambda) = E_\alpha(\lambda)$ かつ $E_{\alpha\le}(\mu) = E_\alpha(\mu)$ なので,
$\lambda < \mu$ ならば $E_\alpha(\lambda) \ge E_\alpha(\mu)$.
step2. $E_\alpha(\lambda)$ が広義凸関数であることを示す.
$\lambda < \mu$ とする. 補題 6.1 より $E_{\alpha\le}(\lambda)$, $E_{\alpha\le}(\mu)$ にはミニマイザーがあり, これを $\rho^*_{\alpha,\ \lambda}$, $\rho^*_{\alpha,\ \mu}$ とする. $E_{\alpha\le}(\lambda) = \mathscr{E}(\rho^*_{\alpha,\ \lambda})$, $E_{\alpha\le}(\mu) = \mathscr{E}(\rho^*_{\alpha,\ \mu})$ であり, $\int \rho^*_{\alpha,\ \lambda} \le \lambda$, $\int \rho^*_{\alpha,\ \mu} \le \mu$ である. 補題 6.1*step*4 で述べたように $\mathscr{E}_\alpha(\rho)$ は狭義凸関数なので, $0 < t < 1$ として,

$$t\mathscr{E}_\alpha(\rho^*_{\alpha,\ \lambda}) + (1-t)\mathscr{E}_\alpha(\rho^*_{\alpha,\ \mu}) \ge \mathscr{E}_\alpha(t\rho^*_{\alpha,\ \lambda} + (1-t)\rho^*_{\alpha,\ \mu}).$$

一方, $\int(t\rho^*_{\alpha,\ \lambda} + (1-t)\rho^*_{\alpha,\ \mu})dx \le t\lambda + (1-t)\mu$ なので,

$$E_{\alpha\le}(t\lambda + (1-t)\mu)) \le \mathscr{E}_\alpha(t\rho^*_{\alpha,\ \lambda} + (1-t)\rho^*_{\alpha,\ \mu}).$$

両式から,

$$\begin{aligned} E_{\alpha\le}(t\lambda + (1-t)\mu)) &\le t\mathscr{E}_\alpha(\rho^*_{\alpha,\ \lambda}) + (1-t)\mathscr{E}_\alpha(\rho^*_{\alpha,\ \mu}) \\ &= tE_{\alpha\le}(\lambda) + (1-t)E_{\alpha\le}(\mu). \end{aligned}$$

補題 6.2 より,

$$E_\alpha(t\lambda + (1-t)\mu)) \le tE_\alpha(\lambda) + (1-t)E_\alpha(\mu).$$

定理 2.2(1) の証明.
定理 2.1(1) より全体のミニマイザー ρ_α があり, $\lambda_\alpha := \int \rho_\alpha$ として ρ_α は $E_\alpha(\lambda_\alpha)$ のミニマイザーでもある. これより $\lambda_\alpha < \lambda$ では $E_\alpha(\lambda)$ はミニマイザーを持たない. なぜなら持つとすると $E_\alpha(\lambda)$ の λ についての広義減少性から, E_α は 2 つのミニマイザーを持つことになり, E_α のミニマイザーの一意性に矛盾するからである.
また $E_\alpha(\lambda)$ の λ についての広義減少性と $E_\alpha(\lambda_\alpha)$ が最小値であることから, $\lambda > \lambda_\alpha$ では $E_\alpha(\lambda) = E_\alpha(\lambda_\alpha)$ と一定値になる.

定理 2.2(2) の証明. step1. $\lambda \leq \lambda_0$ で $E_\alpha(\lambda)$ はミニマイザーを持つことを示す.

背理法. $E_\alpha(\lambda_\alpha)$ はミニマイザーを持ち, $E_\alpha(0)$ もミニマイザーを持つので, もしある $0 < \lambda_1 < \lambda_\alpha$ で, $E_\alpha(\lambda_1)$ がミニマイザーを持たないとすると, $E_{\alpha\leq}(\lambda_1)$ のミニマイザーを $\rho^*_{\alpha,\,\lambda_1}$ として, $\lambda_2 := \int \rho^*_{\alpha,\,\lambda_1} < \lambda_1$ となる.(もし $\int \rho^*_{\alpha,\,\lambda_1} = \lambda_1$ なら $E_\alpha(\lambda_1)$ がミニマイザーを持ってしまうから.)$\rho^*_{\alpha,\,\lambda_1}$ は $E_\alpha(\lambda_2)$ のミニマイザー $\rho_{\alpha,\,\lambda_2}$ である. よって $E_\alpha(\lambda_2) = E_{\alpha\leq}(\lambda_1) = E_\alpha(\lambda_1) > E_\alpha(\lambda_\alpha)$ となるが, これは $E_\alpha(\lambda)$ の広義凸性に矛盾する.

step2. $\lambda \leq \lambda_\alpha$ では $E_\alpha(\lambda)$ は λ について狭義減少であることを示す.

背理法. $0 \leq \lambda_1 < \lambda_2 \leq \lambda_0$ で, $E_\alpha(\lambda_1) = E_\alpha(\lambda_2)$ とすると. それぞれのミニマイザーを ρ_1, ρ_2 とし, $\mathscr{E}_\alpha(\rho)$ の狭義凸性から $E_\alpha(\frac{\lambda_1+\lambda_2}{2}) \leq \mathscr{E}_\alpha(\frac{\rho_1+\rho_2}{2}) < \frac{\mathscr{E}_\alpha(\rho_1)+\mathscr{E}_\alpha(\rho_2)}{2} = \frac{E_\alpha(\lambda_1)+E_\alpha(\lambda_2)}{2} = E_\alpha(\lambda_2)$. これは $E_\alpha(\lambda)$ の広義減少性と矛盾する.

step3. $\lambda \leq \lambda_0$ では $E_\alpha(\lambda)$ は狭義凸であることを示す.

$0 \leq \lambda_1 < \lambda_2 \leq \lambda_0$ に対し, $E_\alpha(\lambda_1)$, $E_\alpha(\lambda_2)$ のミニマイザーをそれぞれ ρ_1, ρ_2 とする. $\mathscr{E}_\alpha(\rho)$ の狭凸性と $\rho_1 \neq \rho_2$ から $0 < t < 1$ で,

$\mathscr{E}_\alpha(t\rho_1 + (1-t)\rho_2) < t\mathscr{E}_\alpha(\rho_1) + (1-t)\mathscr{E}_\alpha(\rho_2)$.

つまり $E_\alpha(t\lambda_1 + (1-t)\lambda_2) < tE_\alpha(\lambda_1) + (1-t)E_\alpha(\lambda_2)$.

6.2 定理 2.2(3) の証明.

補題 6.4 $\lambda > 0$ で, ρ が $E_\alpha(\lambda)$ のミニマイザーである必要十分条件は, 次の式が成り立つことである.

$$\rho(x)^{\frac{2}{3}} = \max\{\frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|} - \int \frac{\rho(y)e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dy + \tilde{\epsilon}_\alpha(\rho),\ 0\},\ \text{但し}$$

$$\tilde{\epsilon}_\alpha(\rho) := \frac{1}{\lambda}\int \rho(x)(\rho^{\frac{2}{3}} - \frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|} + \int \frac{\rho(y)e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dy)dx,\ \lambda := \int \rho dx.$$

$E_\alpha(\lambda)$ がミニマイザー $\rho_{\alpha,\,\lambda}$ を持つとき, $\epsilon_{\alpha F}(\lambda) := \tilde{\epsilon}_\alpha(\rho_{\alpha,\,\lambda})$ と表し, これを $E_\alpha(\lambda)$ のフェルミエネルギーと呼ぶ.

$\lambda > 0$ で $\epsilon_{\alpha F}(\lambda) \leq 0$ であり, 特に ρ_α が E_α 全体のミニマイザーであるとき, $\lambda_\alpha := \int \rho_\alpha dx$ として $\epsilon_{\alpha F}(\lambda_\alpha) = 0$.

(証明) step1. 準備.

$\rho,\ g \in \mathscr{T}_{\partial\lambda}$ および $0 < t < 1$ に対し $\rho_t := (1-t)\rho + tg \in \mathscr{T}_{\partial\lambda}$ であり,

$$\begin{aligned}\mathscr{E}_\alpha(\rho_t) = \frac{3}{5}\int |\rho + t(g-\rho)|^{\frac{5}{3}}dx - \int \frac{(\rho + t(g-\rho))Ze^{-\alpha|x|}}{|x|}dx \\ +\frac{1}{2}\int \frac{(\rho + t(g-\rho))(x)(\rho + t(g-\rho))(y)e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dxdy,\end{aligned}$$

$$\frac{d\mathscr{E}_\alpha(\rho_t)}{dt}|_{t=0+} = \int (\rho^{\frac{2}{3}}(x) - \frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|} + \rho * \frac{e^{-\alpha|x|}}{|x|})(g-\rho)dx \tag{58}$$

$$= \int (\rho^{\frac{2}{3}}(x) - \frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|} + \rho * \frac{e^{-\alpha|x|}}{|x|} - \epsilon_{\alpha F})gdx. \tag{59}$$

但し, $\epsilon_{\alpha F}(\lambda) = \frac{1}{\lambda}\int \rho(x)(\rho^{\frac{2}{3}} - \frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|} + \int \frac{\rho(y)e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dy)dx$.

step2. 必要条件であることを示す.

ρ はミニマイザーなので $0 < t < 1$ に対し $\mathscr{E}_\alpha(\rho) \leq \mathscr{E}_\alpha(\rho_t)$, $\frac{d\mathscr{E}_\alpha(\rho_t)}{dt}|_{t=0+} \geq 0$ となる. $step1$ の式 (59) より $\forall g \in \mathscr{T}_{\partial\lambda}$ に対し $\int(\rho^{\frac{2}{3}} - \frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|} + \rho * \frac{e^{-\alpha|x|}}{|x|} - \epsilon_{\alpha F})gdx \geq 0$ となる. これより,

$$\rho^{\frac{2}{3}}(x) - \frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|} + \rho * \frac{e^{-\alpha|x|}}{|x|} - \epsilon_{\alpha F} \geq 0\ (a.\ e.\ x). \tag{60}$$

なぜなら, そうでないとすると $|A| := \{x|\rho^{\frac{2}{3}} - \frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|} + \rho * e^{-\alpha|x|}|x| - \epsilon_{\alpha F} < 0\}| \neq 0$ となり, $g := \frac{\lambda}{|A|}\chi_A \in \mathscr{T}_{\partial\lambda}$ として, $\int \frac{\lambda}{|A|}\chi_A(\rho^{\frac{2}{3}} - \frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|} + \rho * \frac{e^{-\alpha|x|}}{|x|} - \epsilon_{\alpha F}) < 0$ となり矛盾するからである.

$\epsilon_{\alpha F} = \frac{1}{\lambda}\int \rho(x)(\rho^{\frac{2}{3}} - \frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|} + \int \frac{\rho(y)e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dy)dx$ と $\lambda = \int \rho$ から,
$\int(\rho^{\frac{2}{3}} - \frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|} + \rho * \frac{e^{-\alpha|x|}}{|x|} - \epsilon_{\alpha F})\rho dx = 0$ となる. さらに,

$$\int_{\{\rho>0\}}(\rho^{\frac{2}{3}}(x) - \frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|} + \rho * \frac{e^{-\alpha|x|}}{|x|} - \epsilon_{\alpha F})\rho dx = 0. \tag{61}$$

式 (60) (61) より,

$$\rho^{\frac{2}{3}}(x) - \frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|} + \rho * \frac{e^{-\alpha|x|}}{|x|} - \epsilon_{\alpha F} = 0\ (a.\ e.\ x \in \{\rho > 0\}). \tag{62}$$

これから,

$$\rho^{\frac{2}{3}}(x) = \max\{\frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|} - \int \frac{\rho(y)e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dy + \epsilon_{\alpha F},\ 0\} \text{ in } \mathbb{R}^3\backslash\{0\}. \tag{63}$$

なぜなら $\rho > 0$ の場合は, 式 (62) より, $\rho = 0$ の場合は, 式 (60) によるからである. 補題 4.17 より右辺は連続なので式 (63) は $\mathbb{R}^3\backslash\{0\}$ で成立する.

step3. 十分条件であることを示す.

$\rho^{\frac{2}{3}}(x) = \max\{\frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|} - \int \frac{\rho(y)e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dy + \epsilon_{\alpha F},\ 0\}(a.\ e.\ x)$ なので,

$\rho > 0$ の場合, $\rho^{\frac{2}{3}} - \frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|} + \rho * e^{-\alpha|x|}|x| - \epsilon_{\alpha F} = 0$ より,

$$\int_{\{\rho>0\}}(\rho^{\frac{2}{3}} - \frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|} + \rho * e^{-\alpha|x|}|x|)(g-\rho)dx = \epsilon_{\alpha F}\int_{\{\rho>0\}}(g-\rho). \tag{64}$$

$\rho = 0$ の場合, $\frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|} - \int \frac{\rho(y)e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dy + \epsilon_{\alpha F} \leq 0$ かつ $g - \rho = g \geq 0$ から,

$$\int_{\{\rho=0\}}(\rho^{\frac{2}{3}} - \frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|} + \rho * e^{-\alpha|x|}|x|)(g-\rho)dx \geq \epsilon_{\alpha F}\int_{\{\rho=0\}}(g-\rho). \tag{65}$$

式 (58) (64) (65) より,

$$\frac{d\mathscr{E}_\alpha(\rho_t)}{dt}\Big|_{t=0+} \geq \epsilon_{\alpha F}\int_{\mathbb{R}^3}(g-\rho) = \epsilon_{\alpha F}(\lambda - \lambda) = 0.$$

$\mathscr{E}_\alpha(\rho)$ の狭凸性から,

$$\mathscr{E}_\alpha(g)-\mathscr{E}_\alpha(\rho)=\frac{t\mathscr{E}_\alpha(g)+(1-t)\mathscr{E}_\alpha(\rho)-\mathscr{E}_\alpha(\rho)}{t}>\frac{\mathscr{E}_\alpha(tg+(1-t)\rho)-\mathscr{E}_\alpha(\rho)}{t}.$$

$t\to+0$ で,

$$\mathscr{E}_\alpha(g)-\mathscr{E}_\alpha(\rho)\geq\frac{d\mathscr{E}_\alpha(\rho_t)}{dt}\Big|_{t=0+}. \tag{66}$$

式（65)（66) より,

$$\mathscr{E}_\alpha(g)-\mathscr{E}_\alpha(\rho)\geq 0\ \ \forall g\in\mathscr{T}_{\partial\lambda}.$$

つまり ρ は $E_\alpha(\lambda)$ のミニマイザーである.

step4. $\lambda>0$ で $\epsilon_{\alpha F}(\lambda)\leq 0$ であり, 特に ρ_α が E_α 全体のミニマイザーであるとき, $\lambda_\alpha:=\int\rho_\alpha dx$ として $\epsilon_{\alpha F}(\lambda_\alpha)=0$ を示す.

$E_\alpha(\lambda)=E_{\alpha\leq}(\lambda)$ のミニマイザー $\rho_{\alpha,\,\lambda}$ で $1>h>0$ に対し,
$0\geq\frac{\mathscr{E}_\alpha((1-h)\rho_{\alpha,\,\lambda})-\mathscr{E}_\alpha(\rho_{\alpha,\,\lambda})}{(1-h)-1}$ なので,

$$\begin{aligned}0 &\geq \frac{d\mathscr{E}(t\rho)}{dt}\Big|_{t=1}=\frac{d}{dt}\Big|_{t=1}(t^{\frac{5}{3}}\mathscr{E}_K+t\mathscr{E}_A+t^2D_\alpha)\\ &= \frac{5}{3}\mathscr{E}_K+\mathscr{E}_A+2D_\alpha=\lambda\epsilon_{\alpha F}(\lambda).\end{aligned}$$

よって $\lambda>0$ で $\epsilon_{\alpha F}(\lambda)\leq 0$.

特に ρ_α が E_α 全体のミニマイザーなら $t>0$ に対し,

$$\begin{aligned}0 &= \frac{d\mathscr{E}(t\rho)}{dt}\Big|_{t=1}=\frac{d}{dt}\Big|_{t=1}(t^{\frac{5}{3}}\mathscr{E}_K+t\mathscr{E}_A+t^2D_\alpha)\\ &= \frac{5}{3}\mathscr{E}_K+\mathscr{E}_A+2D_\alpha=\lambda_\alpha\epsilon_{\alpha F}(\lambda_\alpha).\end{aligned}$$

$\lambda_\alpha\neq 0$ なので,（なぜなら $\mathscr{E}_\alpha(\rho)<0$ となる ρ はあるので）$\epsilon_{\alpha F}(\lambda_\alpha)=0$.

定理 2.2(3) の証明. step1. $E_\alpha(\lambda)$ は $0\leq\lambda<\infty$ で連続関数であることを示す.

まず $E_\alpha(\lambda)$ は $0<\lambda<\infty$ で連続関数であることを示す. 一般に $\Omega\in\mathbb{R}^n$ を開集合とし, $f:\Omega\to\mathbb{R}$ が凸関数ならば, 連続関数である ([5, Section2. 1] 参照). 補題 6.3 より, 開集合 $0<\lambda<\infty$ で $E_\alpha(\lambda)$ は凸関数なので連続関数となる.

次に $E_\alpha(\lambda)$ は $\lambda=0$ で連続関数であることを示す.

$E_\alpha(\lambda)$ は減少関数で $E_\alpha(0)=0$ なので, $0\geq E_\alpha(\lambda)$. このことと定理 2.1(1) の証明 $step1$ の (38) から, λ によらない定数を C として,

$$C\geq C+E_\alpha(\lambda)\geq\frac{3}{10}\int\rho_{\alpha,\,\lambda}^{\frac{5}{3}}dx. \tag{67}$$

また補題 4.12 より,

$$\int\frac{\rho(x)_{\alpha,\,\lambda}}{|x|}dx\leq C(\int\rho(x)_{\alpha,\,\lambda}dx)^{\frac{1}{6}}(\int\rho(x)_{\alpha,\,\lambda}^{\frac{5}{3}}dx)^{\frac{1}{2}}. \tag{68}$$

この 2 式より, λ によらない定数 C があって,

$$0>E_\alpha(\lambda)\geq-\int\frac{Z\rho(x)_{\alpha,\,\lambda}e^{-\alpha|x|}}{|x|}dx\geq-\int\frac{Z\rho(x)_{\alpha,\,\lambda}}{|x|}dx\geq-C\lambda^{\frac{1}{6}}.$$

$\lambda \downarrow 0$ とすれば,

$$\lim_{\lambda \downarrow 0} E_\alpha(\lambda) = 0 = E_\alpha(0).$$

これは $E_\alpha(\lambda)$ は $\lambda = 0$ で連続関数であることを意味する.

step2. $0 < \lambda < \infty$ で $E_\alpha(\lambda)$ の右微分が存在し, 右微分は右連続を示す.

まず $E_\alpha(\lambda)$ の $0 < \lambda < \infty$ での右微分の存在を示す. $f(\lambda,\ h) := \frac{E_\alpha(\lambda+h)-E_\alpha(\lambda)}{h}$ $(0 < h)$ とおくと, $E_\alpha(\lambda)$ の広義凸性から $f(\lambda,\ h)$ は $h \downarrow 0$ で単調減少なので, 右微分 $\lim_{h\downarrow 0} f(\lambda,\ h)$ は $-\infty$ も含めれば極限を持つ. $E_\alpha(\lambda)$ の凸性から $\frac{E_\alpha(\lambda+h)-E_\alpha(\lambda)}{h} \geq \frac{E_\alpha(\lambda)-E_\alpha(\frac{\lambda}{2})}{\frac{\lambda}{2}}$ $(0 < h)$ なので, $\lim_{h\downarrow 0} f(\lambda,\ h)$ は有限値である. $h \downarrow 0$ での $f(\lambda,\ h)$ の広義単調性から,

$$\lim_{h\downarrow 0} f(\lambda,\ h) = \inf_{0<h} f(\lambda,\ h). \tag{69}$$

次に $E_\alpha(\lambda)$ の $0 < \lambda < \infty$ での右微分は右連続であることを示す.

$f(\lambda+\mu,\ h) := \frac{E_\alpha(\lambda+\mu+h)-E_\alpha(\lambda+\mu)}{h}$ $(0 < \mu,\ 0 < h)$ を考える.

$E_\alpha(\lambda)$ の連続性から,

$$f(\lambda,\ h) = \lim_{\mu\downarrow 0} f(\lambda+\mu,\ h). \tag{70}$$

$E(\lambda)$ の広義凸性から $f(\lambda,\ h)$ は $\mu \downarrow 0$ で広義単調減少なので,

$$\lim_{\mu\downarrow 0} f(\lambda+\mu,\ h) = \inf_{0<\mu} f(\lambda+\mu,\ h). \tag{71}$$

式 (69) (70) (71) から,

$$\begin{aligned}
&\lim_{h\downarrow 0} f(\lambda,\ h) = \inf_{0<h}\inf_{0<\mu} f(\lambda+\mu,\ h) \\
= &\inf_{0<h\cap 0<\mu} f(\lambda+\mu,\ h) = \inf_{0<\mu}\inf_{0<h} f(\lambda+\mu,\ h) \\
= &\inf_{0<\mu}\lim_{h\downarrow 0} f(\lambda+\mu,\ h) = \lim_{\mu\downarrow 0}\lim_{h\downarrow 0} f(\lambda+\mu,\ h).
\end{aligned}$$

これは右微分が右連続であることを意味する.

step3. $0 < \lambda < \infty$ で $E_\alpha(\lambda)$ の左微分が存在し, 左微分は左連続を示す.

$g(\lambda,\ h) := \frac{E_\alpha(\lambda)-E_\alpha(\lambda-h)}{h}$ $(0 < h < \frac{\lambda}{2})$ とし, $g(\lambda-\mu,\ h) := \frac{E_\alpha(\lambda-\mu)-E_\alpha(\lambda-\mu-h)}{h}$ $(0 < \mu < \frac{\lambda}{2})$ も使って, *step*2 と同様にやればよい.

step4. $E_\alpha(\lambda)$ は λ について C^1 級であることを示す.

まず $\lambda > \lambda_\alpha$ の場合, 定理 2.2(1) より $E_\alpha(\lambda) = E_\alpha$ は一定値なので, C^1 級である.

次に $\lambda < \lambda_\alpha$ の場合, 右微分右連続と左微分左連続は示されているので, 右微分と左微分が等しいことを示せばよい. 以下を示せばよい.

$$\begin{aligned}
&\frac{E_\alpha(\lambda+\epsilon)-E_\alpha(\lambda)}{\epsilon} - \frac{E_\alpha(\lambda)-E_\alpha(\lambda-\epsilon)}{\epsilon} \\
&= \frac{1}{\epsilon}\{E_\alpha(\lambda+\epsilon)+E_\alpha(\lambda-\epsilon)-2E_\alpha(\lambda)\} \downarrow 0\ \ (\epsilon \downarrow 0).
\end{aligned}$$

$\lambda < \lambda_\alpha$ では定理 2.2(2) より $E_\alpha(\lambda)$ はミニマイザーを持つ. これを ρ_0 とする. $E_\alpha(\lambda)$ の凸性に注意すれば, $\frac{1}{\epsilon}\{\mathscr{E}_\alpha(\frac{\lambda+\epsilon}{\lambda}\rho_0)+\mathscr{E}_\alpha(\frac{\lambda-\epsilon}{\lambda}\rho_0)-2\mathscr{E}_\alpha(\rho_0)\} \geq \frac{1}{\epsilon}\{E_\alpha(\lambda+\epsilon)+E_\alpha(\lambda-\epsilon)-2E_\alpha(\lambda)\} \geq 0$ なので, $\epsilon \downarrow 0$ で $\frac{1}{\epsilon}\{\mathscr{E}_\alpha(\frac{\lambda+\epsilon}{\lambda}\rho_0)+\mathscr{E}_\alpha(\frac{\lambda-\epsilon}{\lambda}\rho_0)-2\mathscr{E}_\alpha(\rho_0)\} \downarrow 0$ を示せばよい.

$\frac{\epsilon}{\lambda} =: \delta$ とおく. $\epsilon \downarrow 0$ で $\delta \downarrow 0$ である.

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{\epsilon}\{\mathscr{E}_\alpha(\frac{\lambda+\epsilon}{\lambda}\rho_0) + \mathscr{E}_\alpha(\frac{\lambda-\epsilon}{\lambda}\rho_0) - 2\mathscr{E}_\alpha(\rho_0)\} \\
= \ & \frac{1}{\lambda\delta}\{\mathscr{E}_\alpha((1+\delta)\rho_0) + \mathscr{E}_\alpha(1-\delta)\rho_0) - 2\mathscr{E}_\alpha(\rho_0)\} \\
= \ & \frac{1}{\lambda\delta}[\{(1+\delta)^{\frac{5}{3}} + (1-\delta)^{\frac{5}{3}} - 2\}\mathscr{E}_{\alpha K} + \{(1+\delta)+(1-\delta)-2\}\mathscr{E}_{\alpha A} \\
& \qquad + \{(1+\delta)^2 + (1-\delta)^2 - 2\}D_\alpha \downarrow 0 \qquad (\delta \downarrow 0).
\end{aligned}$$

最後に $\lambda = \lambda_\alpha$ の場合, 右微分は 0 なので, 左微分が 0 を示せばよい. つまり $\frac{E_\alpha(\lambda_\alpha)-E_\alpha(\lambda_\alpha-\epsilon)}{\epsilon} \downarrow 0$ $(\epsilon \downarrow 0)$ を示せばよい. $E_\alpha(\lambda_\alpha)$ のミニマイザーを ρ_α とし, $E_\alpha(\lambda)$ が減少関数であることに注意すれば, $\frac{1}{\epsilon}\{\mathscr{E}_\alpha(\frac{\lambda_\alpha-\epsilon}{\lambda_\alpha}\rho_\alpha) - \mathscr{E}_\alpha(\rho_\alpha)\} \geq \frac{1}{\epsilon}\{E_\alpha(\lambda_\alpha-\epsilon) - E_\alpha(\lambda_\alpha)\} \geq 0$ なので, $\epsilon \downarrow 0$ で $\frac{1}{\epsilon}\{\mathscr{E}_\alpha(\frac{\lambda_0-\epsilon}{\lambda_0}\rho_\alpha) - \mathscr{E}(\rho_\alpha)\} \downarrow 0$ を示せばよい. $\frac{\epsilon}{\lambda_0} =: \delta$ とおく. $\epsilon \downarrow 0$ で $\delta \downarrow 0$ である.

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{\epsilon}\{\mathscr{E}_\alpha(\frac{\lambda_0-\epsilon}{\lambda_0}\rho_\alpha) - \mathscr{E}_\alpha(\rho_\alpha)\} = \frac{1}{\lambda_0\delta}\{\mathscr{E}_\alpha(1-\delta)\rho_\alpha) - \mathscr{E}_\alpha(\rho_\alpha)\} \\
= \ & \frac{1}{\lambda_0\delta}[(1-\delta)^{\frac{5}{3}} - 1\}\mathscr{E}_{\alpha K} + \{(1-\delta)-1\}\mathscr{E}_{\alpha A} + \{(1-\delta)^2 - 1\}D_\alpha \\
\to \ & \frac{1}{\lambda_0}(-\frac{5}{3}\mathscr{E}_{\alpha K} - \mathscr{E}_{\alpha A} - 2D_\alpha) = -\epsilon_{\alpha F}(\lambda_\alpha) = 0 \qquad (\delta \downarrow 0).
\end{aligned}$$

最後のフェルミエネルギー $\epsilon_{\alpha F}(\lambda_\alpha) = 0$ は補題 6.4 による.

step5. $\lambda > 0$ で $E_\alpha(\lambda)$ がミニマイザーを持つとき $\frac{dE_\alpha(\lambda)}{d\lambda} = \epsilon_{\alpha F}(\lambda)$ を示す.

まずは $\lambda = \lambda_\alpha$ の場合, 補題6.4 より $\epsilon_{\alpha F}(\lambda_0) = 0$ また $step4$ より $\frac{dE_\alpha(\lambda)}{d\lambda}|_{\lambda=\lambda_0} = 0$ なので $\frac{dE_\alpha(\lambda)}{d\lambda} = \epsilon_{\alpha F}(\lambda)$.

残るは $0 < \lambda < \lambda_\alpha$ の場合, λ, $\lambda+\epsilon \in (0,\ \lambda_0)$ とし, $E_\alpha(\lambda)$, $E_\alpha(\lambda+\epsilon)$ のミニマイザーを ρ, ρ' とする. $\frac{\epsilon}{\lambda} =: \delta$ とおく.

$$\begin{aligned}
& E_\alpha(\lambda+\epsilon) - E_\alpha(\lambda) = \mathscr{E}_\alpha(\rho') - \mathscr{E}_\alpha(\rho) \leq \mathscr{E}_\alpha((1+\delta)\rho) - \mathscr{E}_\alpha(\rho) \\
= \ & \{(1+\delta)^{\frac{5}{3}} - 1\}\mathscr{E}_{\alpha,\ K} + \{(1+\delta)-1\}\mathscr{E}_{\alpha,\ A} + \{(1+\delta)^2 - 1\}D_\alpha.
\end{aligned}$$

$\epsilon > 0$ の場合.

$$\begin{aligned}
\frac{E_\alpha(\lambda+\epsilon) - E_\alpha(\lambda)}{\epsilon} \leq \ & \frac{1}{\lambda\delta}[\{(1+\delta)^{\frac{5}{3}} - 1\}\mathscr{E}_{\alpha,\ K} + \{(1+\delta)-1\}\mathscr{E}_{\alpha,\ A} \\
& \qquad + \{(1+\delta)^2 - 1\}D_\alpha].
\end{aligned}$$

$\epsilon \downarrow 0$ で,

$$\frac{dE_\alpha(\lambda)}{d\lambda} = \lim_{\epsilon \downarrow 0}\frac{E_\alpha(\lambda+\epsilon) - E_\alpha(\lambda)}{\epsilon} \leq \frac{1}{\lambda}(\frac{5}{3}\mathscr{E}_{\alpha,\ K} + \mathscr{E}_{\alpha,\ A} + 2D_\alpha) = \epsilon_{\alpha F}(\lambda).$$

$\epsilon < 0$ の場合.

$$\frac{E_\alpha(\lambda+\epsilon)-E_\alpha(\lambda)}{\epsilon} \geq \frac{1}{\lambda\delta}[\{(1+\delta)^{\frac{5}{3}}-1\}\mathscr{E}_{\alpha,\ K}+\{(1+\delta)-1\}\mathscr{E}_{\alpha,\ A} \\ +\{(1+\delta)^2-1\}D_\alpha].$$

$\epsilon = -\tilde{\epsilon}$ とおき, $\epsilon \uparrow 0$ つまり $\tilde{\epsilon} \downarrow 0$ で,

$$\frac{dE_\alpha(\lambda)}{d\lambda} = \lim_{\tilde{\epsilon}\downarrow 0}\frac{E_\alpha(\lambda)-E_\alpha(\lambda-\tilde{\epsilon})}{\tilde{\epsilon}} \geq \frac{1}{\lambda}(\frac{5}{3}\mathscr{E}_{\alpha,\ K}+\mathscr{E}_{\alpha,\ A}+2D_\alpha) = \epsilon_{\alpha F}(\lambda).$$

$\epsilon > 0$ の場合と $\epsilon > 0$ の場合をあわせて, $\frac{dE_\alpha(\lambda)}{d\lambda} = \epsilon_{\alpha F}(\lambda)$.

step6. $\lim_{\lambda\downarrow 0}\frac{dE_\alpha(\lambda)}{d\lambda} = -\infty$ を示す. 背理法. $E_\alpha(\lambda)$ が C^1 級で狭義凸関数なので $\frac{dE_\alpha(\lambda)}{d\lambda}$ は狭義減少関数. よって $\lim_{\lambda\downarrow 0}\frac{dE_\alpha(\lambda)}{d\lambda}$ は有限値か $-\infty$ となる. $-\infty$ を否定し $\lim_{\lambda\downarrow 0}\frac{dE_\alpha(\lambda)}{d\lambda} = \lim_{\lambda\downarrow 0}\epsilon_{\alpha F}(\lambda) =: \gamma > -\infty$ とすると,

$$\epsilon_{\alpha F}(\lambda) \geq \gamma > -\infty. \tag{72}$$

ヘルダーの不等式を使い, 次に定理 2.2(3) 証明の $step1$ 式 (62) からわかるように $\rho_{\alpha,\ \lambda}(x)^{\frac{2}{3}} \leq \frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|}$ なので,

$$\begin{aligned}\int\frac{\rho_{\alpha,\ \lambda}(y)e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dy &\leq (\int\rho_{\alpha,\ \lambda}(y)^{\frac{5}{3}}dy)^{\frac{3}{5}}\{\int(\frac{e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|})^{\frac{5}{2}}dy\}^{\frac{2}{5}} \\ &\leq \{\int(\frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|})^{\frac{5}{2}}dy\}^{\frac{3}{5}}\{\int(\frac{e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|})^{\frac{5}{2}}dy\}^{\frac{2}{5}} \leq C.\end{aligned} \tag{73}$$

(72), (73) と補題 12.1 から,

$$\begin{aligned}&\rho_{\alpha,\ \lambda}(x)^{\frac{2}{3}} = \max\{\frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|}-\int\frac{\rho_{\alpha,\ \lambda}(y)e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dy+\epsilon_{\alpha F}(\lambda),\ 0\} \\ &\geq \max\{\frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|}-C+\gamma,\ 0\} \geq \frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|}-C+\gamma.\end{aligned}$$

これより, 開球 $B(r)$ を十分小さくとれば, 正定数 $\delta > 0$ があって, 開球 $B(r)$ 内では $\rho_{\alpha,\ \lambda}(x)^{\frac{2}{3}} \geq \delta > 0$ とできる. これより λ によらず,

$$\int\rho_{\alpha,\ \lambda}(x)dx \geq \int_{B(r)}\rho_{\alpha,\ \lambda}(x) \geq \int_{B(r)}\delta^{\frac{3}{2}} = \delta^{\frac{3}{2}}|B(r)| > 0.$$

これは $\lim_{\lambda\downarrow 0}\int\rho_{\alpha,\ \lambda}(x)dx = 0$ と矛盾する.

7 命題 7.1($\rho_\alpha(x)$ の α に関する一様評価) と 命題 7.2(ρ_α, λ_α, E_α の連続性および単調性) の証明.

7.1 命題 7.1($\rho_\alpha(x)$ の α に関する一様評価) の証明.

命題 7.1 *([6, Theorem IV. 7, 8, 9, 10] 参考)*

$$V_\alpha(x) \le \min\{\frac{Z}{|x|},\ \frac{9}{\pi^2|x|^4}\} \quad (\forall x \in \mathbb{R}^3 \setminus \{0\},\ \forall \alpha \in [0,\ \infty)),$$

$$\rho_\alpha(x) \le \min\{\frac{Z^{\frac{3}{2}}}{|x|^{\frac{3}{2}}},\ \frac{27}{\pi^3|x|^6}\} \quad (\forall x \in \mathbb{R}^3 \setminus \{0\},\ \forall \alpha \in [0,\ \infty)).$$

これより, 任意の $\epsilon > 0$ を固定し, α, r によらない定数 C があって,

$$||\rho_\alpha||_r \le C \quad (\forall \alpha \in [0,\ \infty),\ \frac{1}{2} + \epsilon \le \forall r \le 2 - \epsilon).$$

(証明) step1. $V_\alpha(x) \le \min\{\frac{Z}{|x|},\ \frac{9}{\pi^2|x|^4}\} \quad (\forall x \in \mathbb{R}^3 \setminus \{0\},\ \forall \alpha \in [0,\ \infty))$ を示す. まず,

$$V_\alpha(x) := \frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|} - \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\rho_\alpha(y)e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dy \le \frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|} \le \frac{Z}{|x|}\ (\mathbb{R}^3 \setminus \{0\}).$$

あとは $V_\alpha(x) \le \frac{9}{\pi^2|x|^4}$ $(\mathbb{R}^3 \setminus \{0\})$ を示せばよい. そのためには $h(x) := \frac{9}{\pi^2|x|^4}$, $f(x) := V_\alpha(x) - h(x)$ とおいて, $A_R := \{x \in \mathbb{R}^3 \setminus \{0\} | f > 0,\ |x| > R\}$ として, 十分小さい任意の $R > 0$ で A_R が空集合であることを示せばよい.

f の $\mathbb{R}^3 \setminus \{0\}$ での連続性から,

$$A_R \text{は開集合}. \tag{74}$$

補題 4.17 より $V_\alpha(x) \to 0$ $(|x| \to \infty)$, また $h(x) \to 0$ $(|x| \to \infty)$ より,

$$f(x) \to 0\ (|x| \to \infty). \tag{75}$$

原点のある近傍で $f = V_\alpha - h \le \frac{Z}{|x|} - \frac{9}{\pi^2|x|^4} < 0$ なので, $\mathrm{dist}\{0,\ A_R\} > 0$. よって $\bar{A}_R \subset \mathbb{R}^3 \setminus \{0\}$. また $f \in C^\infty(\mathbb{R}^3 \setminus \{0\})$ なので,

$$f \in C(\bar{A}_R). \tag{76}$$

補題 4.17 より $\Delta V_\alpha = \alpha^2 V_\alpha + 4\pi V_\alpha^{\frac{3}{2}}$ in $\mathbb{R}^3 \setminus \{0\}$, また計算すれば $\Delta h = 4\pi h^{\frac{3}{2}}$ in $\mathbb{R}^3 \setminus \{0\}$ より,

$$-\Delta f = -\Delta(V_\alpha - h) = -\alpha^2 V_\alpha - 4\pi V_\alpha^{\frac{3}{2}} + 4\pi h^{\frac{3}{2}} \le -4\pi V_\alpha^{\frac{3}{2}} + 4\pi h^{\frac{3}{2}} \text{ in } \mathbb{R}^3 \setminus \{0\}.$$

A_R 上では $f = V_\alpha - h > 0$ なので $V_\alpha^{\frac{3}{2}} - h^{\frac{3}{2}} > 0$ となり,

$$-\Delta f < 0 \text{ in } A_R. \tag{77}$$

最大値原理の系 4.4 の仮定を (74), (75), (76), (77) が満たすので,

$$\max_{\bar{A}_R} f(x) \le \max_{\partial A_R} f^+(x).$$

f が連続なので ∂A_R で $f^+(x) = 0$ となり,

$$\max_{\bar{A}_R} f(x) \le 0.$$

これは A_R が空集合であることを意味する.

step2.

*step*1 と $\rho_\alpha = V_\alpha^{\frac{3}{2}}$ から,

$$\rho_\alpha(x) \le \min\{\frac{Z^{\frac{3}{2}}}{|x|},\ \frac{27}{\pi^3|x|^6}\} \quad (\forall x \in \mathbb{R}^3 \setminus \{0\},\ \forall\alpha \in [0,\ \infty)).$$

これより r に依存する定数 C_r があって,

$$||\rho_\alpha||_r \le C_r \quad (\forall\alpha \in [0,\ \infty),\ \frac{1}{2} < \forall r < 2).$$

これから補間公式により, 任意の $\epsilon > 0$ を固定し, $\alpha,\ r$ によらない定数 C があって,

$$||\rho_\alpha||_r \le C \quad (\forall\alpha \in [0,\ \infty),\ \frac{1}{2} + \epsilon \le \forall r \le 2 - \epsilon).$$

7.2 命題 7.2

命題 7.2 α を動かしたときの E_α, λ_α, ρ_α について, 次の性質が成り立つ.

(1) $E_\alpha < 0$, $\lim_{\alpha\to\infty} E_\alpha = 0$ で, E_α は $\alpha \in [0,\ \infty)$ で連続関数.

(2) $\alpha,\ \alpha_0 \in [0,\ \infty)$ として, $\alpha \to \alpha_0$ で, 各点収束 $\rho_\alpha(x) \to \rho_{\alpha_0}(x)$ $(x \in \mathbb{R}^3\setminus\{0\})$ が成り立つ.

(3) $Z \ge \lambda_\alpha > 0$ かつ $\lambda_0 = Z$ で, λ_α は $\alpha \in [0,\ \infty)$ で, α について連続な関数.

(4) $1 \le r \le \frac{5}{3}$ とする. このとき $\alpha,\ \alpha_0 \in [0,\ \infty)$ として, $\alpha \to \alpha_0$ で, 強収束 $\rho_\alpha \to \rho_{\alpha_0}$ in $L^r(\mathbb{R}^3)$ が成り立つ.

(5) E_α は $\alpha \in [0,\ \infty)$ で C^1 級で, 狭義増加関数であって, 次が成り立つ.

$$\begin{aligned} \frac{dE_\alpha}{d\alpha} &= \int Z\rho_\alpha e^{-\alpha|x|} - \frac{1}{2}\int \rho_\alpha(x)\rho_\alpha(y)e^{-\alpha|x-y|}dxdy \qquad (78) \\ &\ge \frac{1}{2}\int \rho_\alpha(x)\rho_\alpha(y)e^{-\alpha|x-y|}dxdy > 0. \end{aligned}$$

$$\text{特に}\frac{dE_\alpha}{d\alpha}|_{\alpha=0} = \frac{1}{2}Z^2. \qquad (79)$$

(6) E_α は $\alpha \in [0,\ \infty)$ で狭義凹関数.

(7) $\alpha > 0$ で, 各点 $x \in \mathbb{R}^3 \backslash \{0\}$ で, $\rho_\alpha(x)$ は α について C^1 級であり,

$$\frac{\partial \rho_\alpha(x)}{\partial \alpha} = \frac{3}{2}\rho_\alpha(x)^{\frac{1}{3}} u_\alpha^*(x) < 0 \ (x \in \mathbb{R}^3 \backslash \{0\}).$$

$\alpha \geq 0$ で, 各点 $x \in \mathbb{R}^3 \backslash \{0\}$ で, $\rho_\alpha(x)$ は α について狭義減少関数であり, $\lambda_\alpha := \int \rho_\alpha dx$ も α について狭義減少関数である.

但し, $u_\alpha^*(x) \in H^1(\mathbb{R}^3)$ は, 以下の弱形式の偏微分方程式に一意に存在する弱解である.

$$\int (\nabla u_\alpha^* \cdot \nabla v + \alpha^2 u_\alpha^* v + 6\pi V_\alpha^{\frac{1}{2}} u_\alpha^* v) dx = -\int 2\alpha V_\alpha v dx. \ (\forall v \in H^1(\mathbb{R}^3)).$$

7.3 命題 7.2(1)(E_α の連続性) の証明.

命題 7.2(1) の証明. step1. $E_\alpha < 0$ かつ $\lim_{\alpha\to\infty} E_\alpha = 0$ を示す.

任意の $\alpha \in [0, \infty)$ に対して $0 > \mathscr{E}_\alpha(\rho)$ となる $\rho \in \mathscr{T}$ があるので $E_\alpha < 0$. (たとえば $\int \frac{Z\rho_0(x)e^{-\alpha|x|}}{|x|} dx > 0$ となる $\rho_0(x)$ に対して $\mathscr{E}_\alpha(\lambda\rho_0(x))$ を考えれば, $\lambda > 0$ を十分小さくとれば $\mathscr{E}_\alpha(\lambda\rho_0(x)) < 0$ となる.) また定理 2.1(1) の証明の $step1$ 式（38) より $E_\alpha \geq -C\frac{Z^{\frac{5}{2}}}{\alpha^{\frac{1}{2}}}$.

両者あわせて $0 > E_\alpha \geq -C\frac{Z^{\frac{5}{2}}}{\alpha^{\frac{1}{2}}}$ より $\lim_{\alpha\to\infty} E_\alpha = 0$.

step2. $\alpha \in [0, \infty)$ での E_α の α についての連続性を示す. E_α, $E_{\alpha+h}$ のミニマイザーを ρ_α, $\rho_{\alpha+h}$ とすると, （$\alpha = 0$ の場合は $h > 0$ と考える. ）

$$\begin{aligned}
\mathscr{E}_{\alpha+h}(\rho_{\alpha+h}) - \mathscr{E}_\alpha(\rho_\alpha) &\geq \mathscr{E}_{\alpha+h}(\rho_{\alpha+h}) - \mathscr{E}_\alpha(\rho_{\alpha+h}), \\
\mathscr{E}_{\alpha+h}(\rho_{\alpha+h}) - \mathscr{E}_\alpha(\rho_\alpha) &\leq \mathscr{E}_{\alpha+h}(\rho_\alpha) - \mathscr{E}_\alpha(\rho_\alpha).
\end{aligned}$$

この 2 つの不等式から,

$$|\mathscr{E}_{\alpha+h}(\rho_{\alpha+h}) - \mathscr{E}_\alpha(\rho_\alpha)| \leq \max\{|\mathscr{E}_{\alpha+h}(\rho_{\alpha+h}) - \mathscr{E}_\alpha(\rho_{\alpha+h})|, |\mathscr{E}_{\alpha+h}(\rho_\alpha) - \mathscr{E}_\alpha(\rho_\alpha)|\}.$$

この不等式から $\mathscr{E}_\alpha(\rho_\alpha)$ の α についての連続性を示すには, $\delta = 0$ または $\delta = h$ として, $I_\delta := |\mathscr{E}_{\alpha+h}(\rho_{\alpha+\delta}) - \mathscr{E}_\alpha(\rho_{\alpha+\delta})| \to 0 \ (h \to 0)$ を示せばよい.

$$\begin{aligned}
I_\delta &:= |\mathscr{E}_{\alpha+h}(\rho_{\alpha+\delta}) - \mathscr{E}_\alpha(\rho_{\alpha+\delta})| \\
&\leq \Big| -\int \frac{Z\rho_{\alpha+\delta}(e^{-(\alpha+h)|x|} - e^{-\alpha|x|})}{|x|} dx \\
&\qquad + \frac{1}{2}\int \rho_{\alpha+\delta}(x)\rho_{\alpha+\delta}(y)\frac{e^{-(\alpha+h)|x-y|} - e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|} dxdy \Big|. \quad (80)
\end{aligned}$$

平均値の定理から $0 < \theta$, $\phi < 1$ として, （θ は $|x|$, ϕ は $|x-y|$ によっている. 今後平均値の定理を使う場合も同様. ）

$$\begin{aligned}
I_\delta &\leq \Big| h\int Z\rho_{\alpha+\delta} e^{-(\alpha+\theta h)|x|} dx - \frac{1}{2}h\int \rho_{\alpha+\delta}(x)\rho_{\alpha+\delta}(y) e^{-(\alpha+\phi h)|x-y|} dxdy) \Big| \\
&\leq |h| \Big\{ Z\int \rho_{\alpha+\delta} dx + \frac{1}{2}\Big(\int \rho_{\alpha+\delta} dx\Big)^2 \Big\} \\
&\leq |h|(Z||\rho_{\alpha+\delta}||_1 + \frac{1}{2}||\rho_{\alpha+\delta}||_1^2). \quad (81)
\end{aligned}$$

命題 7.1 より $||\rho_\alpha||_1$ は α によらない定数 C で押さえられるので,

$$I_\delta := |\mathscr{E}_{\alpha+h}(\rho_{\alpha+\delta}) - \mathscr{E}_\alpha(\rho_{\alpha+\delta})| \le |h|(ZC + \frac{1}{2}C^2) \to 0\ (h \to 0). \tag{82}$$

7.4 命題 7.2(2)($\rho_\alpha(x)$ の α に関する連続性) の証明.

補題 7.3 E_α のミニマイザーを ρ_α とし, $\alpha \to \alpha_0(\alpha,\ \alpha_0 \in [0,\ \infty))$ ならば, $\rho_\alpha \rightharpoonup \rho_{\alpha_0}$ in L^r $(1 < r \le \frac{5}{3})$ と弱収束する.

(証明) step1. まず, 命題 7.1 より, $\{\rho_{\alpha_m}\}$ は $L^r(1 \le r \le \frac{5}{3})$ で有界列である. よって, $m \to \infty$ で $\alpha_m \to \alpha_0$ のとき, $\{\alpha_m\}$ のある部分列 $\{\alpha_n\}$ と $\tilde{\rho} \in L^r(1 < r \le \frac{5}{3})$ が存在し, $\rho_{\alpha_n} \rightharpoonup \tilde{\rho}$ in L^r. また命題 7.1 より, $\{\rho_{\alpha_n}\} \subset \mathscr{T}_{TF}$.

また $\tilde{\rho} \in L^1(\mathbb{R}^3)$ を背理法で示す. $\int \tilde{\rho} = \infty$ とすると, ある χ_A で $|A| < \infty$ かつ $\int \tilde{\rho}\chi_A dx > Z$ となる. ところが定理 2.1(2) より $Z \ge \int \rho_{\alpha_n} dx$, また $\chi_A \in L^{\frac{5}{2}}$ なので, $Z \ge \lim_{n\to\infty} \int \rho_{\alpha_n}\chi_A dx = \int \tilde{\rho}\chi_A dx$ となり矛盾.

以上で補題 4.18(1)(3) の仮定を満たすので,

$$\liminf_{n\to\infty} \mathscr{E}_{\alpha_0}(\rho_{\alpha_n}) \ge \mathscr{E}_{\alpha_0}(\tilde{\rho})\ (\alpha_0 \in [0,\ \infty)). \tag{83}$$

step2. 命題 7.2(1) の式 (80), (81), (82) を導いたのと同様に,

$$|\mathscr{E}_{\alpha_n}(\rho_{\alpha_n}) - \mathscr{E}_{\alpha_0}(\rho_{\alpha_n})| \le |\alpha_n - \alpha_0|(ZC + \frac{1}{2}C^2) \to 0\ (n \to \infty).$$

つまり

$$\lim_{n\to\infty} \mathscr{E}_{\alpha_n}(\rho_{\alpha_n}) - \mathscr{E}_{\alpha_0}(\rho_{\alpha_n}) = 0. \tag{84}$$

命題 7.2(1) の E_α の α についての連続性から,

$$\lim_{n\to\infty} \mathscr{E}_{\alpha_n}(\rho_{\alpha_n}) = \lim_{n\to\infty} E_{\alpha_n} = E_{\alpha_0}. \tag{85}$$

式 (84), (85) から,

$$\begin{aligned}\lim_{n\to\infty} \mathscr{E}_{\alpha_0}(\rho_{\alpha_n}) &= \lim_{n\to\infty} \mathscr{E}_{\alpha_n}(\rho_{\alpha_n}) - \lim_{n\to\infty}(\mathscr{E}_{\alpha_n}(\rho_{\alpha_n}) - \mathscr{E}_{\alpha_0}(\rho_{\alpha_n})) \\ &= \lim_{n\to\infty} \mathscr{E}_{\alpha_n}(\rho_{\alpha_n}) = E_{\alpha_0}. \end{aligned} \tag{86}$$

step3. (83), (86) から, $E_{\alpha_0} \ge \mathscr{E}_{\alpha_0}(\tilde{\rho})$. 逆に $\tilde{\rho} \in \mathscr{T}$ から $E_{\alpha_0} \le \mathscr{E}_{\alpha_0}(\tilde{\rho})$. 従って,

$$E_{\alpha_0} = \mathscr{E}_{\alpha_0}(\tilde{\rho}).$$

E_{α_0} のミニマイザーの一意性から $\tilde{\rho} = \rho_{\alpha_0}$. 部分列の取り方によらず $\tilde{\rho} = \rho_{\alpha_0}$ なので, 部分列をとらなくても, $\alpha \to \alpha_0$ なら $\rho_\alpha \rightharpoonup \rho_{\alpha_0}$ と弱収束する.

命題 7.2(2) の証明. ρ_α はミニマイザーなので定理 2.1(2) から,

$$
\begin{aligned}
\rho_\alpha(x)^{\frac{2}{3}} &= \frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|} - \int \frac{\rho_\alpha(y)e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dy \\
&= \frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|} - \int \frac{\rho_\alpha(y)e^{-\alpha_0|x-y|}}{|x-y|}dy - \int \frac{\rho_\alpha(y)(e^{-\alpha|x-y|} - e^{-\alpha_0|x-y|})}{|x-y|}dy.
\end{aligned} \tag{87}
$$

第2項は, $\alpha_0 = 0$ だとしても $\frac{e^{-\alpha_0|x-y|}}{|x-y|} \in L^{\frac{5}{2}} + L^4$ かつ弱収束 $\rho_\alpha \rightharpoonup \rho_{\alpha_0}$ in $L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3) \cap L^{\frac{4}{3}}(\mathbb{R}^3)$ から,

$$
\lim_{\alpha\to\alpha_0} \int \frac{\rho_\alpha(y)e^{-\alpha_0|x-y|}}{|x-y|}dy = \int \frac{\rho_{\alpha_0}(y)e^{-\alpha_0|x-y|}}{|x-y|}dy. \tag{88}
$$

第 3 項は命題 7.2(1) の式 (80), (81), (82) を導いたのと同様に,

$$
\lim_{\alpha\to\alpha_0} \int \frac{\rho_\alpha(y)(e^{-\alpha|x-y|} - e^{-\alpha_0|x-y|})}{|x-y|}dy = 0. \tag{89}
$$

式（87)（88)（89) から,

$$
\lim_{\alpha\to\alpha_0} \rho_\alpha(x)^{\frac{2}{3}} = \frac{Ze^{-\alpha_0|x|}}{|x|} - \int \frac{\rho_{\alpha_0}(y)e^{-\alpha_0|x-y|}}{|x-y|}dy = \rho_{\alpha_0}(x)^{\frac{2}{3}}.
$$

よって,

$$
\lim_{\alpha\to\alpha_0} \rho_\alpha(x) = \rho_{\alpha_0}(x).
$$

7.5 命題 7.2(3)(λ_α の連続性) の証明.

(証明) 定理 2.1(2) より $Z \geq \lambda_\alpha$. $\lambda_\alpha = 0$ とすると $E_\alpha = 0$ となり, 命題 7.2(1) の $E_\alpha < 0$ に矛盾するので $\lambda_\alpha > 0$. $\lambda_0 = Z$ はすでに ([6, TheoremII. 20]) にある.

命題 7.2(2) より $\lim_{\alpha\to\alpha_0} \rho_\alpha(x) = \rho_{\alpha_0}(x)$. 命題 7.1 より
$\rho_\alpha(x) \leq \min\{\frac{Z^{\frac{3}{2}}}{|x|^{\frac{3}{2}}}, \frac{27}{\pi^3|x|^6}\} \in L^1(\mathbb{R})$. これらよりルベーグ収束定理が使えて,

$$
\lim_{\alpha\to\alpha_0} \lambda_\alpha = \lim_{\alpha\to\alpha_0} \int \rho_\alpha dx = \int \lim_{\alpha\to\alpha_0} \rho_\alpha dx = \int \rho_{\alpha_0} dx = \lambda_{\alpha_0}. \tag{90}
$$

7.6 命題 7.2(4)($\rho_\alpha(x)$ の α に関する $L^1(\mathbb{R}^3)$, $L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3)$ 連続) の証明.

(証明) 命題 7.2(2) より $\lim_{\alpha\to\alpha_0} \rho_\alpha(x)^{\frac{5}{3}} = \rho_{\alpha_0}(x)^{\frac{5}{3}}$. 命題 7.1 より $\rho_\alpha(x)^{\frac{5}{3}} \leq \min\{\frac{Z^{\frac{5}{2}}}{|x|^{\frac{5}{2}}}, \frac{243}{\pi^5|x|^{10}}\} \in L^1(\mathbb{R})$. これらよりルベーグ収束定理が使えて,

$$
\lim_{\alpha\to\alpha_0} \int \rho_\alpha^{\frac{5}{3}} dx = \int \lim_{\alpha\to\alpha_0} \rho_\alpha^{\frac{5}{3}} dx = \int \rho_{\alpha_0}^{\frac{5}{3}} dx. \tag{91}
$$

式 (91) と命題 7.2(3) の式 (90) から $L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3)$ と $L^1(\mathbb{R}^3)$ で ρ_α は ρ_{α_0} へノルム収束. このことと命題 7.2(2) の各点収束から, 補題 4.19 より, $L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3)$ と $L^1(\mathbb{R}^3)$ で ρ_α は ρ_{α_0} へ強収束する. 補間公式より,

$$\rho_\alpha \to \rho_{\alpha_0} \ \text{ in } \ L^r(\mathbb{R}^3)\,(\alpha \to \alpha_0 \in [0,\ \infty),\ 1 \le r \le \frac{5}{3}).$$

7.7 命題 7.2(5)(E_α の狭義増加性) の証明.

(証明) step1. $\frac{dE_\alpha}{d\alpha} = \int Z\rho_\alpha(x)e^{-\alpha|x|}dx - \frac{1}{2}\int \rho_\alpha(x)\rho_\alpha(y)e^{-\alpha|x-y|}dxdy$ 及び $\frac{dE_\alpha}{d\alpha}|_{\alpha=0} = \frac{1}{2}Z^2$ を示す. ([6, 定理 II. 16] 参考).

$h > 0$ として E_α, $E_{\alpha\pm h}$ のミニマイザーを ρ_α, $\rho_{\alpha\pm h}$ とすると, ($\alpha = 0$ のときは $E_{\alpha+h}$, $\rho_{\alpha+h}$ だけ考える.)

$$\frac{E_{\alpha\pm h} - E_\alpha}{h} = \frac{\mathscr{E}_{\alpha\pm h}(\rho_{\alpha\pm h}) - \mathscr{E}_\alpha(\rho_\alpha)}{h} \le \frac{\mathscr{E}_{\alpha\pm h}(\rho_\alpha) - \mathscr{E}_\alpha(\rho_\alpha)}{h} =: I_{\pm h},$$

$$\frac{E_{\alpha\pm h} - E_\alpha}{h} \ge \frac{\mathscr{E}_{\alpha\pm h}(\rho_{\alpha\pm h}) - \mathscr{E}_\alpha(\rho_{\alpha\pm h})}{h} =: J_{\pm h}.$$

よって

$$J_h \le \frac{E_{\alpha+h} - E_\alpha}{h} \le I_h, \quad -I_{-h} \le \frac{E_{\alpha-h} - E_\alpha}{-h} \le -J_{-h}.$$

これより $\frac{E_{\alpha\pm h}-E_\alpha}{\pm h}$ は常に $\pm I_{\pm h}$ と $\pm J_{\pm h}$ で挟まれてるので

$$\pm\lim_{h\downarrow 0} I_{\pm h} = \pm\lim_{h\downarrow 0} J_{\pm h} = \int Z\rho_\alpha e^{-\alpha|x|}dx - \frac{1}{2}\int \rho_\alpha(x)\rho_\alpha(y)e^{-\alpha|x-y|}dxdy$$

を示せばよい.

まず $I_{\pm h}$ について,

$$\begin{aligned} I_{\pm h} = &-\int \frac{Z\rho_\alpha(x)}{|x|}\frac{e^{-(\alpha\pm h)|x|} - e^{-\alpha|x|}}{h}dx \\ &+\frac{1}{2}\int \frac{\rho_\alpha(x)\rho_\alpha(y)}{|x-y|}\frac{e^{-(\alpha\pm h)|x-y|} - e^{-\alpha|x-y|}}{h}dxdy. \end{aligned}$$

平均値の定理から $0 < \theta,\ \phi < 1$ として, (θ は $|x|$, ϕ は $|x-y|$ によっている. 今後平均値の定理を使う場合も同様.)

$$I_{\pm h} = \pm(\int Z\rho_\alpha(x)e^{-(\alpha\pm\theta h)|x|}dx - \frac{1}{2}\int \rho_\alpha(x)\rho_\alpha(y)e^{-(\alpha\pm\phi h)|x-y|}dxdy).$$

$|Z\rho_\alpha e^{-(\alpha\pm\theta h)|x|}| \le Z\rho_\alpha \in L^1(\mathbb{R}^3)$ 及び $|\rho_\alpha(x)\rho_\alpha(y)e^{-(\alpha\pm\phi h)|x-y|}| \le \rho_\alpha(x)\rho_\alpha(y) \in L^1(\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3)$ から $I_{\pm h}$ で $h\downarrow 0$ としたとき, ルベーグ収束定理が使えて,

$$I_{\pm h} \to \pm(\int Z\rho_\alpha(x)e^{-\alpha|x|}dx - \frac{1}{2}\int \rho_\alpha(x)\rho_\alpha(y)e^{-\alpha|x-y|}dxdy)\ \ (h\downarrow 0). \tag{92}$$

次に $J_{\pm h}$ について, $I_{\pm h}$ と同様に平均値の定理から $0 < \theta,\ \phi < 1$ として,

$$J_{\pm h} = \pm(\int Z\rho_{\alpha\pm h}(x)e^{-(\alpha\pm\theta h)|x|}dx - \frac{1}{2}\int \rho_{\alpha\pm h}(x)\rho_{\alpha\pm h}(y)e^{-(\alpha\pm\phi h)|x-y|}dxdy).$$

命題 7.2(2) より

$$\lim_{h\downarrow 0} Z\rho_{\alpha\pm h}e^{-(\alpha\pm\theta h)|x|} = Z\rho_\alpha e^{-\alpha|x|},$$
$$\lim_{h\downarrow 0} \rho_{\alpha\pm h}(x)\rho_{\alpha\pm h}(y)e^{-(\alpha\pm\phi h)|x-y|} = \rho_\alpha(x)\rho_\alpha(y)e^{-\alpha|x-y|}.$$

命題 7.1 より

$$|Z\rho_{\alpha\pm h}e^{-(\alpha\pm\theta h)|x|}| \le Z\rho_{\alpha\pm h} \le Z\min\{\frac{Z^{\frac{3}{2}}}{|x|^{\frac{3}{2}}},\ \frac{27}{\pi^3|x|^6}\} \in L^1(\mathbb{R}^3),$$
$$|\rho_{\alpha\pm h}(x)\rho_{\alpha\pm h}(y)e^{-(\alpha\pm\phi h)|x-y|}| \le \rho_{\alpha\pm h}(x)\rho_{\alpha\pm h}(y)$$
$$\le \min\{\frac{Z^{\frac{3}{2}}}{|x|^{\frac{3}{2}}},\ \frac{27}{\pi^3|x|^6}\}\min\{\frac{Z^{\frac{3}{2}}}{|y|^{\frac{3}{2}}},\ \frac{27}{\pi^3|y|^6}\} \in L^1(\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3).$$

これらから $J_{\pm h}$ で $h\downarrow 0$ としたとき, ルベーグ収束定理が使えて,

$$J_{\pm h} \to \pm(\int Z\rho_\alpha(x)e^{-\alpha|x|}dx - \frac{1}{2}\int \rho_\alpha(x)\rho_\alpha(y)e^{-\alpha|x-y|}dxdy)\ \ (h\downarrow 0). \tag{93}$$

(92), (93) から,

$$\frac{dE_\alpha}{d\alpha} = \int Z\rho_\alpha(x)e^{-\alpha|x|}dx - \frac{1}{2}\int \rho_\alpha(x)\rho_\alpha(y)e^{-\alpha|x-y|}dxdy.$$

特に $\alpha = 0$ で,

$$\frac{dE_\alpha}{d\alpha}|_{\alpha=0} = \int Z\rho_0(x)dx - \frac{1}{2}\int \rho_0(x)\rho_0(y)dxdy = Z^2 - \frac{1}{2}Z^2 = \frac{1}{2}Z^2.$$

(93) を導いたときと同様にルベーグ収束定理が使えるので

$$\lim_{\alpha\to\alpha_0}\frac{dE_\alpha}{d\alpha} = \lim_{\alpha\to\alpha_0}\int Z\rho_\alpha(x)e^{-\alpha|x|}dx - \frac{1}{2}\int \rho_\alpha(x)\rho_\alpha(y)e^{-\alpha|x-y|}dxdy$$
$$= \int Z\rho_{\alpha_0}(x)e^{-\alpha_0|x|}dx - \frac{1}{2}\int \rho_{\alpha_0}(x)\rho_{\alpha_0}(y)e^{-\alpha_0|x-y|}dxdy = \frac{dE_\alpha}{d\alpha}\Big|_{\alpha_0}.$$

これは $\frac{dE_\alpha}{d\alpha}$ が α について連続を意味する.

step2.

$$\begin{aligned}\frac{dE_\alpha}{d\alpha} &= \int Z\rho_\alpha e^{-\alpha|x|}dx - \frac{1}{2}\int \rho_\alpha(x)\rho_\alpha(y)e^{-\alpha|x-y|}dxdy \\ &\ge \frac{1}{2}\int \rho_\alpha(x)\rho_\alpha(y)e^{-\alpha|x-y|}dxdy > 0\end{aligned}$$

を示す. $\alpha = 0$ の場合は自明. $\alpha \neq 0$ の場合で示す. 定理 2.1(2) より, $Z \ge \lambda_\alpha$ なので,

$$Ze^{-\alpha|x|} - \int \rho_\alpha(y)e^{-\alpha|x-y|}dy \ge \int \rho_\alpha(y)e^{-\alpha|x|}dy - \int \rho_\alpha(y)e^{-\alpha|x-y|}dy.$$

両辺に $\rho_\alpha(x)$ をかけて, 積分し被積分関数が非負値なら積分の順番は変えられるので,

$$
\begin{aligned}
&\int \rho_\alpha Z e^{-\alpha|x|}dx - \int \rho_\alpha(x)\rho_\alpha(y)e^{-\alpha|x-y|}dydx \\
&\geq \int \rho_\alpha(x)\rho_\alpha(y)(e^{-\alpha|x|} - e^{-\alpha|x-y|})dxdy \\
&= \int \rho_\alpha(y)\int_{|x-y|\geq|x|} \rho_\alpha(x)(e^{-\alpha|x|} - e^{-\alpha|x-y|})dxdy \\
&\quad + \int \rho_\alpha(y)\int_{|x-y|\leq|x|} \rho_\alpha(x)(e^{-\alpha|x|} - e^{-\alpha|x-y|})dxdy.
\end{aligned}
$$

第 1 項で $\tilde{x} := x - \frac{y}{2}$, 第 2 項で $\tilde{x} := -x + \frac{y}{2}$ とし, $\rho_\alpha(x) = \rho_\alpha(-x)$ に注意して,

$$
\begin{aligned}
&\int \rho_\alpha Z e^{-\alpha|x|}dx - \int \rho_\alpha(x)\rho_\alpha(y)e^{-\alpha|x-y|}dydx \\
&\geq \int \rho_\alpha(y)\Big\{\int_{|\tilde{x}-\frac{y}{2}|\geq|\tilde{x}+\frac{y}{2}|} \rho_\alpha(\tilde{x}+\frac{y}{2})(e^{-\alpha|\tilde{x}+\frac{y}{2}|} - e^{-\alpha|\tilde{x}-\frac{y}{2}|})d\tilde{x}\Big\}dy \\
&\quad + \int \rho_\alpha(y)\Big\{\int_{|\tilde{x}+\frac{y}{2}|\leq|\tilde{x}-\frac{y}{2}|} \rho_\alpha(\tilde{x}-\frac{y}{2})(e^{-\alpha|\tilde{x}-\frac{y}{2}|} - e^{-\alpha|\tilde{x}+\frac{y}{2}|})d\tilde{x}\Big\}dy \\
&= \int_{|\tilde{x}-\frac{y}{2}|\geq|\tilde{x}+\frac{y}{2}|} \rho_\alpha(y)(\rho_\alpha(\tilde{x}+\frac{y}{2}) - \rho_\alpha(\tilde{x}-\frac{y}{2}))(e^{-\alpha|\tilde{x}+\frac{y}{2}|} - e^{-\alpha|\tilde{x}-\frac{y}{2}|})d\tilde{x}dy.
\end{aligned}
$$

$\rho(r)$ は定理 2.1(4) より減少関数なので, 領域 $|\tilde{x}-\frac{y}{2}| \geq |\tilde{x}+\frac{y}{2}|$ では, $\rho_j(\tilde{x}+\frac{y}{2}) - \rho_j(\tilde{x}-\frac{y}{2}) \geq 0$, $e^{-\alpha_j r}$ も減少関数なので $e^{-\alpha_j|\tilde{x}+\frac{y}{2}|} - e^{-\alpha_j|\tilde{x}-\frac{y}{2}|} \geq 0$ である. よって被積分関数が非負値なので,

$$
\begin{aligned}
&\int \rho_j Z e^{-\alpha_j|x|}dx - \int \rho_j(x)\rho_j(y)e^{-\alpha_j|x-y|}dydx \geq 0 \\
&\int \rho_j Z e^{-\alpha_j|x|}dx - \frac{1}{2}\int \rho_j(x)\rho_j(y)e^{-\alpha_j|x-y|}dydx \\
&\geq \frac{1}{2}\int \rho_j(x)\rho_j(y)e^{-\alpha_j|x-y|}dydx > 0.
\end{aligned}
$$

7.8　命題 7.2(6)(E_α の狭義凹性) の証明.

(証明)

E_α が α について $[0,\ \infty)$ 上狭義凹関数を示すには, 補題 4.6 から, E_α が α について $[0,\ \infty)$ 上連続関数なので, $\alpha \geq \kappa > 0$ なる任意の α, κ に対して $E_\alpha > \frac{E_{\alpha+\kappa}+E_{\alpha-\kappa}}{2}$ を示せばよい. よって E_α, $E_{\alpha+\kappa}$, $E_{\alpha-\kappa}$ のミニマイザーを

ρ_α, $\rho_{\alpha+\kappa}$, $\rho_{\alpha-\kappa}$ とし, 次の I が正値を示せばよい.

$$\begin{aligned} I: &= 2E_\alpha - E_{\alpha+\kappa} - E_{\alpha-\kappa} \\ &= 2\mathscr{E}_\alpha(\rho_\alpha) - \mathscr{E}_{\alpha+\kappa}(\rho_{\alpha+\kappa}) - \mathscr{E}_{\alpha-\kappa}(\rho_{\alpha-\kappa}) \\ &\geq 2\mathscr{E}_\alpha(\rho_\alpha) - \mathscr{E}_{\alpha+\kappa}(\rho_\alpha) - \mathscr{E}_{\alpha-\kappa}(\rho_\alpha) \\ &= -Z\int \frac{\rho_\alpha}{|x|}(2e^{-\alpha|x|} - e^{-(\alpha+\kappa)|x|} - e^{-(\alpha-\kappa)|x|})dx \\ &\quad + \frac{1}{2}\int \frac{\rho_\alpha(x)\rho_\alpha(y)}{|x-y|}(2e^{-\alpha|x-y|} - e^{-(\alpha+\kappa)|x-y|} - e^{-(\alpha-\kappa)|x-y|})dxdy \\ &= 2Z\int \frac{\rho_\alpha(x)e^{-\alpha|x|}}{|x|}(\cosh(\kappa|x|)-1)dx \\ &\quad - \int \frac{\rho_\alpha(x)\rho_\alpha(y)e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}(\cosh(\kappa|x-y|)-1)dxdy. \end{aligned}$$

$Z \geq \int \rho_\alpha(y)dy$ と $\frac{1}{|x-y|} \leq \frac{|x|+|y|}{|x-y|^2}$ より,

$$\begin{aligned} I &\geq \int \rho_\alpha(y)\Big\{2\int \frac{\rho_\alpha(x)|x|e^{-\alpha|x|}}{|x|^2}(\cosh(\kappa|x|)-1)dx \\ &\quad - \int \frac{\rho_\alpha(x)(|x|+|y|)e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|^2}(\cosh(\kappa|x-y|)-1)dx\Big\}dy. \end{aligned}$$

第 2 項で x, y の対称性から, $|x|+|y|$ を $2|x|$ にかえることができ,

$$\begin{aligned} I &\geq 2\int \rho_\alpha(y)\Big\{\int \rho_\alpha(x)|x|\frac{e^{-\alpha|x|}((\cosh(\kappa|x|)-1)}{|x|^2}dx \\ &\quad - \int \rho_\alpha(x)|x|\frac{e^{-\alpha|x-y|}(\cosh(\kappa|x-y|)-1)}{|x-y|^2}dx\Big\}dy. \end{aligned}$$

$\rho_\alpha(x)$ は球対称関数なので, $\rho(|x|)$ とも表記することにし,
$f(|x|) := \rho_\alpha(|x|)|x|$, $g(|x|) := \frac{e^{-\alpha|x|}((\cosh(\kappa|x|)-1)}{|x|^2}$ とおくと,

$$I \geq 2\int \rho_\alpha(y)\int f(|x|)(g(|x|) - g(|x-y|))dxdy =: J.$$

右辺を書き換える.

$$\begin{aligned} J = 2\int \rho_\alpha(y)\{&\int_{|x-y|>|x|} f(|x|)(g(|x|) - g(|x-y|))dx \\ &+ \int_{|x-y|<|x|} f(|x|)(g(|x|) - g(|x-y|))dx\}dy. \end{aligned}$$

第 1 項で $\tilde{x} := x - \frac{y}{2}$, 第 2 項で $\tilde{x} := -x + \frac{y}{2}$ とし, $A_y := \{\tilde{x} | |\tilde{x} - \frac{y}{2}| > |\tilde{x} + \frac{y}{2}|\}$ とおいて,

$$\begin{aligned} J &= 2\int \rho_\alpha(y)\Big\{\int_{|\tilde{x}-\frac{y}{2}|>|\tilde{x}+\frac{y}{2}|} f(|\tilde{x}+\frac{y}{2}|)(g(|\tilde{x}+\frac{y}{2}|) - g(|\tilde{x}-\frac{y}{2}|))d\tilde{x} \\ &\quad + \int_{|\tilde{x}-\frac{y}{2}|>|\tilde{x}+\frac{y}{2}|} f(|\tilde{x}-\frac{y}{2}|)(g(|\tilde{x}-\frac{y}{2}|) - g(|\tilde{x}+\frac{y}{2}|)d\tilde{x}\Big\}dy \\ &= 2\int \rho_\alpha(y)\int_{A_y}\{f(|\tilde{x}+\frac{y}{2}| - f(|\tilde{x}-\frac{y}{2}|\}\{g(|\tilde{x}+\frac{y}{2}| - g(|\tilde{x}-\frac{y}{2}|\}d\tilde{x}dy. \end{aligned}$$

$f(r) := \rho_\alpha(r)r$ と $g(r) := \frac{e^{-\alpha r}((\cosh(\kappa r)-1)}{r^2}$ が $r>0$ で狭義減少関数であれば J はつまり I は正値となる. 定理 2.1(4) より $f(r)$ は狭義減少関数なので, $g(r)$ が狭義減少であることを示せばよい.

$$
\begin{aligned}
g(r) &= \frac{2e^{-\alpha r}\sinh^2(\frac{\kappa r}{2})}{r^2},\\
g'(r) &= -\frac{2\alpha e^{-\alpha r}\sinh^2(\frac{\kappa r}{2})}{r^2} - \frac{4e^{-\alpha r}\sinh^2(\frac{\kappa r}{2})}{r^3} + \frac{2\kappa e^{-\alpha r}\sinh(\frac{\kappa r}{2})\cosh(\frac{\kappa r}{2})}{r^2}.
\end{aligned}
$$

一部 $\frac{\kappa r}{2} =: t$ として, 整理して,

$$
g'(r) = -\frac{4e^{-\alpha r}\sinh t}{r^3}\{\frac{(\alpha-\kappa)r}{2}\sinh t + (t+1)\sinh t - t\cosh t\}.
$$

$h(t) := (t+1)\sinh t - t\cosh t$ とおくと, $h'(t) = \sinh t + te^{-t} > 0 (t>0)$, $h(0)=0$ より $h(t) > 0 (t>0)$. また仮定より $\alpha - \kappa \geq 0$ なので $g'(t) > 0 (t>0)$. つまり $g(r)$ は狭義減少.

7.9 命題 7.2(7)($\rho_\alpha(x)$ の α に関する狭義減少性) の証明.

補題 7.4 $\alpha > 0$, $V_\alpha(x) := \frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|} - \int \rho_\alpha(y)\frac{e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dy$ $(x \in \mathbb{R}^3\backslash\{0\})$ とし, $u, v \in H^1(\mathbb{R}^3)$ に対し, 次の式は両辺とも有限値である.

$$
\int(\nabla u\cdot\nabla v + \alpha^2 uv + 6\pi V_\alpha^{\frac{1}{2}} uv)dx = -\int 2\alpha V_\alpha v dx. \tag{94}
$$

さらに任意の $v \in H^1(\mathbb{R}^3)$ に対しこの式を満たす $u =: u_\alpha^* \in H^1(\mathbb{R}^3)$ がただ 1 つ存在する. そして $u_\alpha^* \in C^\infty(\mathbb{R}^3\backslash\{0\})$ かつ $u_\alpha^*(x) < 0$ $(x \in \mathbb{R}^3\backslash\{0\})$ である.

(証明) step1. 以下のように $H^1(\mathbb{R}^3)$ 上の線形汎関数 T を定める.

$$
T : H^1(\mathbb{R}^3) \ni v \mapsto \mathbb{R} \ni Tv := -\int 2\alpha V_\alpha v dx.
$$

定理 2.1(4) と命題 7.1 より $0 < V_\alpha(x) \leq \min\{\frac{Z}{|x|}, \frac{9}{\pi^2|x|^4}\}$ なので $V_\alpha \in L^2(\mathbb{R}^3)$ に注意して,

$$
|Tv| = |\int 2\alpha V_\alpha v dx| \leq 2\alpha(\int V_\alpha^2 dx)^{\frac{1}{2}}(\int v^2 dx)^{\frac{1}{2}} \leq 2\alpha(\int V_\alpha^2 dx)^{\frac{1}{2}}||v||_{H^1} < \infty.
$$

これより（94) の右辺は有限値で, T は $H^1(\mathbb{R}^3)$ 上の連続線形汎関数.

次に以下のように $H^1(\mathbb{R}^3)\times H^1(\mathbb{R}^3)$ 上の双線形形式 $a(u, v)$ を定める.

$$
a : H^1(\mathbb{R}^3)\times H^1(\mathbb{R}^3) \ni (u, v) \mapsto \mathbb{R} \ni a(u, v) := \int(\nabla u\cdot\nabla v + \alpha^2 uv + 6\pi V_\alpha^{\frac{1}{2}} uv)dx.
$$

ここで, ヘルダーの不等式と命題 7.1 より $0 < V_\alpha(x) \leq \min\{\frac{Z}{|x|}, \frac{9}{\pi^2|x|^4}\} \leq \frac{Z}{|x|}$ なので,

$$
\begin{aligned}
\int V_\alpha^{\frac{1}{2}} uv dx &\leq (\int V_\alpha u^2 dx)^{\frac{1}{2}}(\int v^2 dx)^{\frac{1}{2}} \leq (\int \frac{Z}{|x|}u^2 dx)^{\frac{1}{2}}(\int v^2 dx)^{\frac{1}{2}}\\
&\leq Z^{\frac{1}{2}}(\int \frac{u^2}{|x|^2}dx)^{\frac{1}{4}}(\int u^2 dx)^{\frac{1}{4}}(\int v^2 dx)^{\frac{1}{2}}.
\end{aligned}
$$

ここでハーディ不等式 $\int \frac{u^2}{|x|^2}dx \leq 4\int |\nabla u|^2 dx\ (\forall u \in H^1(\mathbb{R}^3))$ より,

$$\int V_\alpha^{\frac{1}{2}} uv dx \leq (2Z)^{\frac{1}{2}}(\int |\nabla u|^2 dx)^{\frac{1}{4}}(\int u^2 dx)^{\frac{1}{4}}(\int v^2 dx)^{\frac{1}{2}} \leq (2Z)^{\frac{1}{2}}||u||_{H^1}||v||_{H^1}.$$

これを使って,

$$\begin{aligned}
a(u,\ v) &:= \int (\nabla u \cdot \nabla v + \alpha^2 uv + 6\pi V_\alpha^{\frac{1}{2}} uv)dx \\
&\leq (\int |\nabla u|^2 dx)^{\frac{1}{2}}(\int |\nabla v|^2 dx)^{\frac{1}{2}} + \alpha^2(\int u^2 dx)^{\frac{1}{2}}(\int v^2 dx)^{\frac{1}{2}} \\
&\qquad + 6\pi(2Z)^{\frac{1}{2}}||u||_{H^1}||v||_{H^1} \\
&\leq (1 + \alpha^2 + 6\pi(2Z)^{\frac{1}{2}})||u||_{H^1}||v||_{H^1} < \infty.
\end{aligned}$$

これより（94) の左辺は有限値で, $a(u,\ v)$ は $H^1(\mathbb{R}^3) \times H^1(\mathbb{R}^3)$ 上の連続双線形形式である. さらに,

$$a(u,\ u) := \int (|\nabla u|^2 + \alpha^2 u^2 + 6\pi V_\alpha^{\frac{1}{2}} u^2)dx \geq \min\{1,\ \alpha^2\}||u||_{H^1}^2.$$

以上より T が $H^1(\mathbb{R}^3)$ 上連続線形汎関数, a が $H^1(\mathbb{R}^3) \times H^1(\mathbb{R}^3)$ 上の強圧的連続双線形形式なので, ラックスミルグラムの定理より,

$$\exists ! u_\alpha^* \in H^1(\mathbb{R}^3)\ s.\ t.\ a(u_\alpha^*,\ v) = Tv\ (\forall v \in H^1(\mathbb{R}^3)).$$

step2. $u_\alpha^* \in H^1(\mathbb{R}^3 \setminus \{0\})$ であり, 任意の $v \in C_c^\infty(\mathbb{R}^3 \setminus \{0\})$ に対し u_α^* は（94) を満たし, さらに $\alpha^2 + 6\pi V_\alpha^{\frac{1}{2}} \in C^\infty(\mathbb{R}^3 \setminus \{0\})$, $-2V_\alpha \in C^\infty(\mathbb{R}^3 \setminus \{0\})$ なので, 正則性に関する補題 4.9 より $u_\alpha^* \in C^\infty(\mathbb{R}^3 \setminus \{0\})$ である.

次に $u_\alpha^*(x) \leq 0\ (x \in \mathbb{R}^3 \setminus \{0\})$ を示す. 補題 4.10 より $u^{*+} := \max\{u_\alpha^*,\ 0\} \in H^1(\mathbb{R}^3)$ なので（94) の v として $u^{*+} := \max\{u_\alpha^*,\ 0\}$ をとることができる. 補題 4.10 の $u^{*+}u^{*-} = \nabla u^{*+} \cdot \nabla u^{*-} = 0$ と定理 2.1(4) の $V_\alpha(x) > 0\ (x \in \mathbb{R}^3 \setminus \{0\})$ に注意して,

$$\int (|\nabla u^{*+}|^2 + \alpha^2 (u^{*+})^2 + 6\pi V_\alpha^{\frac{1}{2}} (u^{*+})^2)dx = -\int 2\alpha V_\alpha u^{*+} dx \leq 0.$$

これより $u^{*+} = 0\ (a.\ e.\ x)$ つまり $u_\alpha^* = u^{*+} - u^{*-} \leq 0\ (a.\ e.\ x)$. ところで $u_\alpha^* \in C^\infty(\mathbb{R}^3 \setminus \{0\})$ なので $u_\alpha^*(x) \leq 0\ (x \in \mathbb{R}^3 \setminus \{0\})$ となる.

step3. 次に $u_\alpha^*(x) < 0\ (x \in \mathbb{R}^3 \setminus \{0\})$ を示す. $u_\alpha^* \in C^\infty(\mathbb{R}^3 \setminus \{0\})$ は, $\phi \in C_c^\infty(\mathbb{R}^3 \setminus \{0\})$ にたいしては, 部分積分して境界での積分が 0 なので,

$$\int (-\Delta u_\alpha^* + \alpha^2 u_\alpha^* + 6\pi V_\alpha^{\frac{1}{2}} u_\alpha^*)\phi dx = -\int 2\alpha V_\alpha \phi dx.\ (\forall \phi \in C_c^\infty(\mathbb{R}^3 \setminus \{0\})).$$

これより, 変分学の基本補題と $V_\alpha,\ u_\alpha^* \in C^\infty(\mathbb{R}^3 \setminus \{0\})$ から,

$$-\Delta u_\alpha^* + \alpha^2 u_\alpha^* + 6\pi V_\alpha^{\frac{1}{2}} u_\alpha^* = -2\alpha V_\alpha \text{ in } \mathbb{R}^3 \setminus \{0\}. \tag{95}$$

$U_{rR} := \{x \in \mathbb{R}^3 | 0 < r < |x| < R\}$ として強最大値原理の補題 4.5 の仮定 $u_\alpha^* \in C^2(U_{rR}) \cap C(\bar{U}_{rR})$, $\alpha^2 + 6\pi V_\alpha^{\frac{1}{2}} \in L^\infty(U_{rR})$, $\alpha^2 + 6\pi V_\alpha^{\frac{1}{2}} \geq 0$, $(-\Delta + \alpha^2 + 6\pi V_\alpha^{\frac{1}{2}}) u_\alpha^* = -2\alpha V_\alpha \leq 0$ in U_{rR} を u_α^* は満たす. 従ってもし U_{rR} のどこかで $u_\alpha^* = 0$ と最大値 0 をとると $u_\alpha^*(x) \equiv 0$ in U_{rR} となるが, (95) より $V_\alpha(x) \equiv 0$ in U_{rR} となり $V_\alpha(x) > 0$ と矛盾する. よって $u_\alpha^*(x) < 0$ in U_{rR}. $0 < r < R$ となる任意の r, R で成立するので $u_\alpha^*(x) < 0$ $(x \in \mathbb{R}^3 \setminus \{0\})$ となる.

補題 7.5 $\alpha > 0$, $\frac{\alpha}{2} > |h| > 0$ とし, C_α を h によらない定数として,

$$D_h V_\alpha := \frac{V_{\alpha+h} - V_\alpha}{h},\ W_{h,\ \alpha} := \frac{V_{\alpha+h} + V_{\alpha+h}^{\frac{1}{2}} V_\alpha^{\frac{1}{2}} + V_\alpha}{V_{\alpha+h}^{\frac{1}{2}} + V_\alpha^{\frac{1}{2}}} \text{とおくと,}$$

$$0 < W_{h,\ \alpha}(x) \leq \frac{2Z^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{\alpha}{4}|x|}}{|x|^{\frac{1}{2}}}\ (x \in \mathbb{R}^3 \backslash \{0\}),\ W_{h,\ \alpha} \in \cap_{0<r<6} L^r(\mathbb{R}^3), \quad (96)$$

$$D_h V_\alpha \in H^1(\mathbb{R}^3),\ D_h V_\alpha \in C(\mathbb{R}^3),\ \exists C_\alpha > 0\ s.\,t.\ ||D_h V_\alpha||_{H^1} \leq C_\alpha. \quad (97)$$

(証明) step1. $0 < W_{h,\ \alpha}(x) < \frac{e^{-\frac{\alpha}{4}|x|}}{|x|^{\frac{1}{2}}}$ $(x \in \mathbb{R}^3 \backslash \{0\})$ を示す .

V_α, $V_{\alpha+h} > 0$ より $W_{h,\ \alpha}(x) > 0$. また定理 2.1(2) の $V_\alpha := \frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|} - \int \frac{\rho_\alpha(y) e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|} dy$ から,

$$\begin{aligned} W_{h,\ \alpha} : &= \frac{V_{\alpha+h} + V_{\alpha+h}^{\frac{1}{2}} V_\alpha^{\frac{1}{2}} + V_\alpha}{V_{\alpha+h}^{\frac{1}{2}} + V_\alpha^{\frac{1}{2}}} < \frac{(V_{\alpha+h}^{\frac{1}{2}} + V_\alpha^{\frac{1}{2}})^2}{V_{\alpha+h}^{\frac{1}{2}} + V_\alpha^{\frac{1}{2}}} = V_{\alpha+h}^{\frac{1}{2}} + V_\alpha^{\frac{1}{2}} \\ &\leq \frac{Z^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{\alpha+h}{2}|x|}}{|x|^{\frac{1}{2}}} + \frac{Z^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{\alpha}{2}|x|}}{|x|^{\frac{1}{2}}} \leq \frac{2Z^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{\alpha}{4}|x|}}{|x|^{\frac{1}{2}}}. \end{aligned}$$

step2. $D_h V_\alpha \in L^2(\mathbb{R}^3)$, $D_h V_\alpha \in C(\mathbb{R}^3)$ と $D_h V_\alpha$ の満たす微分方程式を導く.

命題 7.1 より $0 < V_\alpha \leq \min\{\frac{Z}{|x|},\ \frac{9}{\pi^2 |x|^4}\}$ なので $V_\alpha \in L^2(\mathbb{R}^3)$. よって $D_h V_\alpha \in L^2(\mathbb{R}^3)$. 次に定理 2.1(2) より,

$$V_{\alpha+h} := \frac{Ze^{-(\alpha+h)|x|}}{|x|} - \int \frac{\rho_{\alpha+h}(y) e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|} dy,$$
$$V_\alpha := \frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|} - \int \frac{\rho_\alpha(y) e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|} dy.$$

これより,

$$\begin{aligned} D_h V_\alpha : &= \frac{V_{\alpha+h} - V_\alpha}{h} \\ &= \frac{Z}{h|x|}(e^{-(\alpha+h)|x|} - e^{-\alpha|x|}) - \frac{1}{h} \int \frac{\rho_{\alpha+h}(y) e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|} dy \\ &\qquad + \frac{1}{h} \int \frac{\rho_\alpha(y) e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|} dy. \end{aligned}$$

補題 4.2 より第 2 項, 第 3 項は $\mathbb{R}^3$ で連続関数. 第 1 項も $\lim_{|x|\to\infty} \frac{Z}{h|x|}(e^{-(\alpha+h)|x|} - e^{-\alpha|x|}) = -Z$ より, これを $\frac{Z}{h|x|}(e^{-(\alpha+h)|x|} - e^{-\alpha|x|})$ の $x = 0$ での値とすれば第 1 項も $\mathbb{R}^3$ で連続関数. よって $D_h V_\alpha \in C(\mathbb{R}^3)$.

補題 4.17 と $V_\alpha \in C^\infty(\mathbb{R}^3 \setminus \{0\})$ より, $\mathbb{R}^3 \setminus \{0\}$ で,

$$
\begin{aligned}
(-\Delta + (\alpha+h)^2)V_{\alpha+h} &= -4\pi V_{\alpha+h}^{\frac{3}{2}}, \\
(-\Delta + \alpha^2)V_\alpha &= -4\pi V_\alpha^{\frac{3}{2}}.
\end{aligned}
$$

辺々引いて h で割って

$$
(-\Delta + \alpha^2)(\frac{V_{\alpha+h} - V_\alpha}{h}) + (2\alpha + h)V_{\alpha+h} = -4\pi(\frac{V_{\alpha+h}^{\frac{3}{2}} - V_\alpha^{\frac{3}{2}}}{h}).
$$

次の式に注意して,

$$
\begin{aligned}
\frac{V_{\alpha+h}^{\frac{3}{2}} - V_\alpha^{\frac{3}{2}}}{h} &= (\frac{V_{\alpha+h} - V_\alpha}{h})(\frac{V_{\alpha+h}^{\frac{3}{2}} - V_\alpha^{\frac{3}{2}}}{V_{\alpha+h} - V_\alpha}) = D_h V_\alpha(\frac{V_{\alpha+h} + V_{\alpha+h}^{\frac{1}{2}}V_\alpha^{\frac{1}{2}} + V_\alpha}{V_{\alpha+h}^{\frac{1}{2}} + V_\alpha^{\frac{1}{2}}}) \\
&= D_h V_\alpha W_{h,\,\alpha}.
\end{aligned}
$$

$W_{h,\,\alpha},\ D_h V_\alpha,\ V_{\alpha+h} \in C^\infty(\mathbb{R}^3 \setminus \{0\})$ なので $D_h V_\alpha$ は古典的な意味で次の微分方程式を満たす,

$$
(-\Delta + (\alpha^2 + 4\pi W_{h,\,\alpha}))D_h V_\alpha = -(2\alpha + h)V_{\alpha+h}\ (x \in \mathbb{R}^3 \setminus \{0\}). \tag{98}
$$

step3. $\int |\nabla D_h V_\alpha|^2 dx + \int (D_h V_\alpha)^2 dx < \infty$ を示す.

定数 $k > 0$ があって, 次の条件を満たす $\eta(x),\ \eta_n(x)$ がある.

$$
\eta \in C^\infty(\mathbb{R}^3),\ 0 \le \eta(x) \le 1,\ \eta(x) = \begin{cases} 0 & (|x| \le 1) \\ 1 & (|x| \ge 2) \end{cases},\ |\nabla \eta(x)| \le k,\ \eta_n(x) = \eta(nx).
$$

定数 $k > 0$ があって, 次の条件を満たす $\zeta(x),\ \zeta_n(x)$ がある.

$$
\zeta \in C^\infty(\mathbb{R}^3),\ 0 \le \zeta(x) \le 1,\ \zeta(x) = \begin{cases} 1 & (|x| \le 1) \\ 0 & (|x| \ge 2) \end{cases},\ |\nabla \zeta(x)| \le k,\ \zeta_n(x) = \zeta(\frac{x}{n}).
$$

(98) に $(\eta_n\zeta_n)^2 D_h V_\alpha$ をかけて $\mathbb{R}^3$ で積分すると,

$$
\begin{aligned}
\int (-\Delta D_h V_\alpha)(\eta_n\zeta_n)^2 D_h V_\alpha dx + \int (\alpha^2 + 4\pi W_{h,\,\alpha})(\eta_n\zeta_n)^2 (D_h V_\alpha)^2 dx \\
= -\int (2\alpha + h)V_{\alpha+h}(\eta_n\zeta_n)^2 D_h V_\alpha dx.
\end{aligned} \tag{99}
$$

左辺の第 1 項を部分積分する. そのとき表面 $\partial B(2n),\ \partial B(\frac{1}{n})$ で $\eta_n\zeta_n = 0$ なので左辺の第 1 項は,

$$
\begin{aligned}
I_1 &:= \int (-\Delta D_h V_\alpha)(\eta_n\zeta_n)^2 D_h V_\alpha dx = \int \nabla D_h V_\alpha \cdot \nabla((\eta_n\zeta_n)^2 D_h V_\alpha)dx \\
&= \int (\eta_n\zeta_n)^2 \nabla D_h V_\alpha \cdot \nabla D_h V_\alpha dx + 2\int (\eta_n\zeta_n) D_h V_\alpha \nabla D_h V_\alpha \cdot \nabla(\eta_n\zeta_n)dx.
\end{aligned}
$$

さらにシュヴァルツの不等式, 次に相加相乗平均の不等式を使い、最後に $\epsilon = \frac{1}{2}$ とし,

$$\begin{aligned} I_1 &\geq \int (\eta_n\zeta_n)^2|\nabla D_hV_\alpha|^2dx - 2\int(\eta_n\zeta_n)|D_hV_\alpha||\nabla D_hV_\alpha||\nabla(\eta_n\zeta_n)|dx \\ &\geq \int(\eta_n\zeta_n)^2|\nabla D_hV_\alpha|^2dx - \epsilon\int(\eta_n\zeta_n)^2|\nabla D_hV_\alpha|^2dx \\ &\qquad\qquad\qquad\qquad -\frac{1}{\epsilon}\int|D_hV_\alpha|^2|\nabla(\eta_n\zeta_n)|^2dx \\ &= \frac{1}{2}\int(\eta_n\zeta_n)^2|\nabla D_hV_\alpha|^2dx - 2\int|D_hV_\alpha|^2|\nabla(\eta_n\zeta_n)|^2dx. \end{aligned}$$

これと (99) から,

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2}\int(\eta_n\zeta_n)^2|\nabla D_hV_\alpha|^2dx + \int(\alpha^2+4\pi W_{h,\,\alpha}))(\eta_n\zeta_n)^2(D_hV_\alpha)^2dx \\ &\leq 2\int|D_hV_\alpha|^2|\nabla(\eta_n\zeta_n)|^2dx + \int(2\alpha+h)V_{\alpha+h}(\eta_n\zeta_n)^2|D_hV_\alpha|dx. \end{aligned} \tag{100}$$

ここで $n\to\infty$ の極限をとる. 左辺と右辺第 2 項は単調収束定理から,

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2}\int(\eta_n\zeta_n)^2|\nabla D_hV_\alpha|^2dx \to \frac{1}{2}\int|\nabla D_hV_\alpha|^2dx, \\ &\int(\alpha^2+4\pi W_{h,\,\alpha}))(\eta_n\zeta_n)^2(D_hV_\alpha)^2dx \to \int(\alpha^2+4\pi W_{h,\,\alpha}))(D_hV_\alpha)^2dx, \\ &\int(2\alpha+h)V_{\alpha+h}(\eta_n\zeta_n)^2|D_hV_\alpha|dx \to \int(2\alpha+h)V_{\alpha+h}|D_hV_\alpha|dx. \end{aligned} \tag{101}$$

最後に (100) の右辺第 1 項の極限が 0 であることを示す. $|\nabla\eta_n||\nabla\zeta_n| = 0$ に注意して,

$$\begin{aligned} &\int|D_hV_\alpha|^2|\nabla(\eta_n\zeta_n)|^2dx \leq \int(|\zeta_n\nabla\eta_n|+|\eta_n\nabla\zeta_n|)^2|D_hV_\alpha|^2dx \\ &\leq \int(|\nabla\eta_n|+|\nabla\zeta_n|)^2|D_hV_\alpha|^2dx \leq \int(|\nabla\eta_n|^2+|\nabla\zeta_n|^2)|D_hV_\alpha|^2dx =: I_2+I_3. \end{aligned}$$

$D_hV_\alpha \in C(\mathbb{R}^3)$ よりある定数 $C>0$ があって $|x|<1$ で $|D_hV_\alpha|^2 \leq C$ であり, $\mathrm{supp}|\nabla\eta_n| \subset \{x|\frac{1}{n}\leq|x|\leq\frac{2}{n}\}$ なので,

$$\begin{aligned} I_2 &\leq C\int_{\frac{1}{n}\leq|x|\leq\frac{2}{n}}|\nabla\eta_n|^2dx \leq C\int_{\frac{1}{n}\leq|x|\leq\frac{2}{n}}n^2|\nabla\eta|^2dx \\ &\leq Cn^2k^2\frac{4\pi}{3}(\frac{2}{n})^3 \to 0\ (n\to\infty). \end{aligned}$$

ある定数 $C>0$ があって $|x|>1$ で $|D_hV_\alpha| \leq \frac{V_{\alpha+h}+V_\alpha}{h} \leq \frac{1}{h}(\frac{Ze^{-(\alpha+h)|x|}}{|x|}+\frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|}) \leq \frac{Ce^{-\frac{\alpha}{2}|x|}}{|x|}$ なので,

$$I_3 \leq C^2\int_{n\leq|x|\leq2n}|\nabla\zeta_n|^2\frac{e^{-\alpha|x|}}{|x|^2}dx \leq C^2\frac{k^2}{n^2}\frac{e^{-\alpha n}}{n^2}\frac{4\pi}{3}(2n)^3 \to 0\ (n\to\infty).$$

これで (100) の右辺第 1 項の極限が 0 であることを示された. これと (101) から, (100) の $n \to \infty$ での極限は,

$$\frac{1}{2}\int |\nabla D_h V_\alpha|^2 dx + \int (\alpha^2 + 4\pi W_{h,\,\alpha}))(D_h V_\alpha)^2 dx \le \int (2\alpha + h) V_{\alpha+h} |D_h V_\alpha| dx.$$

$V_{\alpha+h} \in L^2(\mathbb{R}^3)$ と $step1$ から $D_h V_\alpha \in L^2(\mathbb{R}^3)$ なので, $\min\{\frac{1}{2},\ \alpha\} =: \frac{1}{C_\alpha}$ とおけば,

$$\int |\nabla D_h V_\alpha|^2 + (D_h V_\alpha)^2 dx \le C_\alpha (2\alpha + h)(\int V_{\alpha+h}^2 dx)^{\frac{1}{2}} (\int |D_h V_\alpha|^2 dx)^{\frac{1}{2}} < \infty. (102)$$

step4. $D_h V_\alpha \in H^1(\mathbb{R}^3),\ \exists C_\alpha > 0\ s.t.\ ||D_h V_\alpha||_{H^1} \le C_\alpha$ を示す.

$D_h V_\alpha$ の $\mathbb{R}^3$ での弱微分が古典的な意味での微分 $\nabla D_h V_\alpha$ にほとんどいたるところで等しいことを確認する. つまり以下を確かめる.

$$\int D_h V_\alpha \frac{\partial \phi}{\partial x_i} dx = -\int \frac{\partial D_h V_\alpha}{\partial x_i} \phi dx\ (\forall \phi \in C_c^\infty(\mathbb{R}^3),\ i = 1,\ 2,\ 3).$$

まず,

$$\begin{aligned}\int D_h V_\alpha \frac{\partial \phi}{\partial x_i} dx &= \lim_{\epsilon \downarrow 0} \int_{\mathbb{R}^3 \setminus B(\epsilon)} D_h V_\alpha \frac{\partial \phi}{\partial x_i} dx \\ &= \lim_{\epsilon \downarrow 0} \int_{\mathbb{R}^3 \setminus B(\epsilon)} \frac{\partial (D_h V_\alpha \phi)}{\partial x_i} dx - \lim_{\epsilon \downarrow 0} \int \chi_{\mathbb{R}^3 \setminus B(\epsilon)} \frac{\partial D_h V_\alpha}{\partial x_i} \phi dx.\end{aligned}$$

右辺第 1 項は $D_h V_\alpha \phi$ が $\mathbb{R}^3$ で連続なので, 定数 $C > 0$ があって, $\partial B(\epsilon)$ での単位法線ベクトルの i 成分を ν_i として,

$$\lim_{\epsilon \downarrow 0} |\int_{\mathbb{R}^3 \setminus B(\epsilon)} \frac{\partial (D_h V_\alpha \phi)}{\partial x_i} dx| = \lim_{\epsilon \downarrow 0} |\int_{\partial B(\epsilon)} (D_h V_\alpha \phi) \nu_i dS| \le \lim_{\epsilon \downarrow 0} C 4\pi \epsilon^2 = 0.$$

右辺第 2 項は $\lim_{\epsilon \downarrow 0} \chi_{\mathbb{R}^3 \setminus B(\epsilon)} \frac{\partial D_h V_\alpha}{\partial x_i} \phi = \frac{\partial D_h V_\alpha}{\partial x_i} \phi$ 及び, $\mathrm{supp}\phi$ を含むコンパクト集合を K, ϕ の最大値を C とし, (102) より $\frac{\partial D_h V_\alpha}{\partial x_i} \in L^2(\mathbb{R}^3)$ なので $|\chi_{\mathbb{R}^3 \setminus B(\epsilon)} \frac{\partial D_h V_\alpha}{\partial x_i} \phi|$ $\le C|\chi_K \frac{\partial D_h V_\alpha}{\partial x_i}| \in L^1(\mathbb{R}^3)$. これらよりルベーグ収束定理により,

$$\lim_{\epsilon \downarrow 0} \int \chi_{\mathbb{R}^3 \setminus B(\epsilon)} \frac{\partial D_h V_\alpha}{\partial x_i} \phi dx = -\int \frac{\partial D_h V_\alpha}{\partial x_i} \phi dx.$$

以上より $D_h V_\alpha$ の $\mathbb{R}^3$ での弱微分は $\nabla D_h V_\alpha$ である. これと (102) より $D_h V_\alpha \in H^1(\mathbb{R}^3)$.

h によらない定数 C_α があって, $||\ D_h V_\alpha||_{H^1} \le C_\alpha$ となることを示す. 命題 7.1 より $0 < V_\alpha \le \min\{\frac{Z}{|x|},\ \frac{9}{\pi^2 |x|^4}\} =: M(x) \in L^2(\mathbb{R}^3)$ なので, (102) より,

$$||\ D_h V_\alpha||_{H^1}^2 \le C_\alpha \frac{5}{2} \alpha (\int M(x) dx)^{\frac{1}{2}} ||\ D_h V_\alpha||_{H^1}.$$

$||\ D_h V_\alpha||_{H^1} = 0$ とすると, (98) から $V_\alpha = 0$ となり, $V_\alpha > 0$ に矛盾する. よって $||\ D_h V_\alpha||_{H^1} > 0$ で両辺割って,

$$||\ D_h V_\alpha||_{H^1} \le C_\alpha \frac{5}{2} \alpha (\int M(x) dx)^{\frac{1}{2}}.$$

補題 7.6 $\alpha > 0,\ h \to 0$ で $D_h V_\alpha \rightharpoonup u_\alpha^*$ in $H^1(\mathbb{R}^3)$ と弱収束する. 但し u_α^* は以下の弱形式の偏微分方程式に一意存在する弱解である.

$$\int (\nabla u_\alpha^* \cdot \nabla v + \alpha^2 u_\alpha^* v + 6\pi V_\alpha^{\frac{1}{2}} u_\alpha^* v) dx = -\int 2\alpha V_\alpha v dx.\ (\forall v \in H^1(\mathbb{R}^3)).$$

(証明) step1. 補題 7.5 より h によらない定数 C_α があって $\|D_h V_\alpha\|_{H^1} \le C_\alpha$ なので, $K \subset \mathbb{R}^3$ を任意のコンパクト集合として次が成り立つ ([5, Section8. 6]).

$m \to \infty$ で $h_m \to 0$ のとき $\exists \{h_n\}_{n=0}^\infty \subset \{h_m\}_{m=0}^\infty$ かつ $\exists \tilde{u} \in H^1(\mathbb{R}^3))\ s.\ t.$
弱収束 $D_h V_\alpha \rightharpoonup \tilde{u}$ in $H^1(\mathbb{R}^3)$ かつ強収束 $D_h V_\alpha \to \tilde{u}$ in $L^2(K)$.

補題 7.5 の (98) で h として h_n をとり, $\phi \in C_c^\infty(\mathbb{R}^3 \backslash \{0\})$ をかけて $\mathbb{R}^3$ で積分すると, 第 1 項は部分積分し表面積分の項は 0 になるので,

$$\int \nabla D_{h_n} V_\alpha \cdot \nabla \phi dx + \int \alpha^2 D_{h_n} V_\alpha \phi dx + \int 4\pi W_{h_n,\ \alpha} D_{h_n} V_\alpha \phi dx$$
$$= -\int (2\alpha + h_n) V_{\alpha + h_n} \phi dx\ (\forall \phi \in C_c^\infty(\mathbb{R}^3 \backslash \{0\})). \quad (103)$$

この式で $h_n \to 0$ の極限をとると次の式になることを示していく.

$$\int (\nabla \tilde{u} \cdot \nabla \phi + \alpha^2 \tilde{u} \phi + 6\pi V_\alpha^{\frac{1}{2}} \tilde{u} \phi) dx = -\int 2\alpha V_\alpha \phi dx.\ (\forall \phi \in C_c^\infty(\mathbb{R}^3 \setminus \{0\})).$$

そのために (103) を書き換えて,

$$\int \nabla D_{h_n} V_\alpha \cdot \nabla \phi dx + \int \alpha^2 D_{h_n} V_\alpha \phi dx + \int 6\pi V_\alpha^{\frac{1}{2}} \tilde{u} \phi dx$$
$$+ \int 6\pi V_\alpha^{\frac{1}{2}} (D_{h_n} V_\alpha - \tilde{u}) \phi dx + \int (4\pi W_{h_n,\ \alpha} - 6\pi V_\alpha^{\frac{1}{2}}) D_{h_n} V_\alpha \phi dx$$
$$= -\int (2\alpha + h_n) V_{\alpha + h_n} \phi dx\ (\forall \phi \in C_c^\infty(\mathbb{R}^3 \backslash \{0\})). \quad (104)$$

step2. まず (104) 左辺第 5 項の $I := |\int (4\pi W_{h_n,\ \alpha} - 6\pi V_\alpha^{\frac{1}{2}}) D_{h_n} V_\alpha \phi dx| \to 0\ (n \to \infty)$ を示す. 補題 7.5 より $W_{h_n,\ \alpha} \in L^2(\mathbb{R}^3)$, $D_{h_n} V_\alpha \in L^2(\mathbb{R}^3)$, また命題 7.1 より $0 < V_\alpha \le \min\{\frac{Z}{|x|},\ \frac{9}{\pi^2 |x|^4}\}$ なので $V_\alpha^{\frac{1}{2}} \in L^2(\mathbb{R}^3)$ なので, $|\phi|$ の最大値を C' とし, $\mathrm{supp}\phi \subset K$ となるコンパクト集合を K として,

$$I \le C' \|D_{h_n} V_\alpha\|_{L^2(K)} \|4\pi W_{h_n,\ \alpha} - 6\pi V_\alpha^{\frac{1}{2}}\|_{L^2(K)}$$
$$\le C' \|D_{h_n} V_\alpha\|_{H^1(\mathbb{R}^3)} \|4\pi W_{h_n,\ \alpha} - 6\pi V_\alpha^{\frac{1}{2}}\|_{L^2(K)} \le C \|4\pi W_{h_n,\ \alpha} - 6\pi V_\alpha^{\frac{1}{2}}\|_{L^2(K)}.$$

この右辺に $n \to \infty$ でルベーグ収束定理が使えることを次に確認する. 命題 7.2(2) より $V_\alpha = \rho_\alpha^{\frac{2}{3}}$ は α について連続なので,

$$\lim_{n\to\infty} W_{h_n,\ \alpha} := \lim_{n\to\infty} \frac{V_{\alpha+h_n} + V_{\alpha+h_n}^{\frac{1}{2}} V_\alpha^{\frac{1}{2}} + V_\alpha}{V_{\alpha+h_n}^{\frac{1}{2}} + V_\alpha^{\frac{1}{2}}} = \frac{V_\alpha + V_\alpha^{\frac{1}{2}} V_\alpha^{\frac{1}{2}} + V_\alpha}{V_\alpha^{\frac{1}{2}} + V_\alpha^{\frac{1}{2}}} = \frac{3}{2} V_\alpha^{\frac{1}{2}} \text{ より},$$

$$\lim_{n\to\infty} (4\pi W_{h_n,\ \alpha} - 6\pi V_\alpha^{\frac{1}{2}})^2 = 0.$$

補題 7.5 より $W_{h,\,\alpha}(x) \le \frac{2Z^{\frac{1}{2}}e^{-\frac{\alpha}{4}|x|}}{|x|^{\frac{1}{2}}}$ なので, また命題 7.1 より $0 < V_\alpha \le \min\{\frac{Z}{|x|},\ \frac{9}{\pi^2|x|^4}\}$ なので, ある定数 C があって,

$$|4\pi W_{h_n,\,\alpha} - 6\pi V_\alpha^{\frac{1}{2}}|^2 \le 2(|4\pi W_{h_n,\,\alpha}|^2 + |6\pi V_\alpha^{\frac{1}{2}}|^2) \le \frac{Ce^{-\frac{\alpha}{2}|x|}}{|x|} + \frac{C}{|x|} \in L^1(K).$$

以上でルベーグ収束定理が使えることがわかったので,

$$I \le C||4\pi W_{h_n,\,\alpha} - 6\pi V_\alpha^{\frac{1}{2}}||_{L^2(K)} \to 0\ (n \to \infty). \tag{105}$$

step3. 次に (104) の左辺第 1 項, 第 2 項は $D_h V_\alpha \rightharpoonup \tilde{u}$ in $H^1(\mathbb{R}^3)$ より $D_h V_\alpha \rightharpoonup \tilde{u}$ in $L^2(\mathbb{R}^3)$ かつ $\frac{\partial}{\partial x_i} D_h V_\alpha \rightharpoonup \frac{\partial}{\partial x_i}\tilde{u}$ in $L^2(\mathbb{R}^3)$ であり, $\phi,\ \frac{\partial}{\partial x_i}\phi \in L^2(\mathbb{R}^3)$ なので,

$$\lim_{n\to\infty}\int \nabla D_{h_n} V_\alpha \cdot \nabla\phi dx = \int \nabla\tilde{u}\cdot\nabla\phi dx, \tag{106}$$

$$\lim_{n\to\infty}\int \alpha^2 D_{h_n} V_\alpha \phi dx = \int \alpha^2 \tilde{u}\phi dx. \tag{107}$$

次に (104) 左辺第 4 項の $J := |\int 6\pi V_\alpha^{\frac{1}{2}}(D_{h_n}V_\alpha - \tilde{u})\phi dx| \to 0\ (n \to \infty)$ を示す. supp$\phi \subset K$ となるコンパクト集合を K とし, そこでの連続関数 $|6\pi V_\alpha^{\frac{1}{2}}\phi|$ の最大値を C とする. 強収束 $D_{h_n}V_\alpha \to \tilde{u}$ in $L^2(K)$ に注意すれば,

$$J \le C|\int_K (D_{h_n}V_\alpha - \tilde{u})dx| \le C|K|^{\frac{1}{2}}||D_{h_n}V_\alpha - \tilde{u}||_{L^2(K)} \to 0\ (n \to \infty). \tag{108}$$

最後に (104) の右辺は V_α の α についての連続性から $\lim_{n\to\infty} V_{\alpha+h_n}\phi = V_\alpha\phi$. ϕ の最大値を C とし, また命題 7.1 より $0 < V_\alpha \le \min\{\frac{Z}{|x|},\ \frac{9}{\pi^2|x|^4}\} =: M(x) \in L^1(\mathbb{R}^3)$ なので $|V_{\alpha+h_n}\phi| \le C|M(x)| \in L^1(\mathbb{R}^3)$. 以上よりルベーグ収束定理が使えて,

$$\lim_{n\to\infty}(-\int (2\alpha + h_n)V_{\alpha+h_n}\phi dx) = -2\alpha\int V_\alpha\phi dx. \tag{109}$$

(104), (105), (106), (107), (108), (109) より,

$$\int(\nabla\tilde{u}\cdot\nabla\phi + \alpha^2\tilde{u}\phi + 6\pi V_\alpha^{\frac{1}{2}}\tilde{u}\phi)dx = -\int 2\alpha V_\alpha\phi dx.\ (\forall\phi \in C_c^\infty(\mathbb{R}^3 \setminus \{0\})).$$

補題 4.20 より $C_c^\infty(\mathbb{R}^3 \setminus \{0\})$ は $H^1(\mathbb{R}^3)$ で稠密なので,

$$\int(\nabla\tilde{u}\cdot\nabla\phi + \alpha^2\tilde{u}\phi + 6\pi V_\alpha^{\frac{1}{2}}\tilde{u}\phi)dx = -\int 2\alpha V_\alpha\phi dx.\ (\forall\phi \in H^1(\mathbb{R}^3)).$$

ところで補題 7.4 より, このような $\tilde{u}$ は一意に存在し, それを u_α^* としたので $\tilde{u} = u_\alpha^*$. これは部分列の取り方によらないので部分列をとらなくても,

$$\alpha > 0,\ h \to 0 \text{ で } D_h V_\alpha \rightharpoonup u_\alpha^* \text{ in } H^1(\mathbb{R}^3) \text{ と弱収束する.}$$

補題 7.7 $K \subset \mathbb{R}^3\backslash\{0\}$ なる任意のコンパクト集合 K 上で, $\alpha > 0,\ h \to 0$ で $\max_{x\in K} |D_h V_\alpha(x) - u^*_\alpha(x)| \to 0$. 特に $\frac{\partial V_\alpha(x)}{\partial \alpha} = u^*_\alpha(x)\ (x \in \mathbb{R}^3 \setminus \{0\})$.

(証明) step1. 補題 7.6 の (103) と補題 4.20 の $C^\infty_c(\mathbb{R}^3\backslash\{0\})$ の $H^1(\mathbb{R}^3)$ での稠密性から $D_h V_\alpha$ は次を満たす.

$$\int \nabla D_h V_\alpha \cdot \nabla v dx + \int \alpha^2 D_h V_\alpha v dx + \int 4\pi W_{h,\ \alpha} D_h V_\alpha v dx$$
$$= -\int (2\alpha + h) V_{\alpha+h} v dx\ (\forall v \in H^1(\mathbb{R}^3)).$$

また補題 7.4 にあるように u^*_α は次を満たす.

$$\int (\nabla u^*_\alpha \cdot \nabla v + \alpha^2 u^*_\alpha v + 6\pi V_\alpha^{\frac{1}{2}} u^*_\alpha v) dx = -\int 2\alpha V_\alpha v dx\ (\forall v \in H^1(\mathbb{R}^3)).$$

この 2 式を辺辺引いて移項すれば

$$\int \nabla(D_h V_\alpha - u^*_\alpha) \cdot \nabla v dx + \int \alpha^2 (D_h V_\alpha - u^*_\alpha) v dx$$
$$= -\int (4\pi W_{h,\ \alpha} D_h V_\alpha - 6\pi V_\alpha^{\frac{1}{2}} u^*_\alpha) v dx - 2\alpha \int (V_{\alpha+h} - V_\alpha) v dx$$
$$-h \int V_{\alpha+h} v dx,$$
$$f := -(4\pi W_{h,\ \alpha} D_h V_\alpha - 6\pi V_\alpha^{\frac{1}{2}} u^*_\alpha) - 2\alpha(V_{\alpha+h} - V_\alpha) - h V_{\alpha+h}.$$

ここで領域 $D_r := \{x \in \mathbb{R}^3 | 0 < r < |x|\}$, $v \in C^\infty_c(D_r) \subset H^1(\mathbb{R}^3)$ として, $D_h V_\alpha - u^*_\alpha$ が正則性の補題 4.8 の仮定を満たすことを確認する. D_r 上, $D_h V_\alpha - u^*_\alpha$ は $(-\Delta + \alpha^2) u = f$ の弱解 u であり, $\alpha^2 \in L^\infty(D_r)$, 補題 7.5, 補題 7.4 より, $D_h V_\alpha - u^*_\alpha \in H^1(\mathbb{R}^3)$ である. 最後に $f \in L^2(D_r)$ を確認する. 補題 7.5 より D_r で $W_{h,\ \alpha}$ は有界, 命題 7.1 より D_r で V_α も有界, これと $D_h V_\alpha,\ u^*_\alpha \in L^2(D_r)$ から $(4\pi W_{h,\ \alpha} D_h V_\alpha - 6\pi V_\alpha^{\frac{1}{2}} u^*_\alpha) \in L^2(D_r)$, また命題 7.1 より D_r で $V_\alpha,\ V_{\alpha+h} \in L^2(D_r)$ なので $2\alpha(V_{\alpha+h} - V_\alpha) + h V_{\alpha+h} \in L^2(D_r)$. よって $f \in L^2(D_r)$. 以上で正則性の補題 4.8 の仮定は満たされるので以下の結果を得る.

$$\begin{aligned}
&\forall D_1 \Subset \forall D_2 \Subset D_r \text{ に対し} \exists C s.t. \\
&||D_h V_\alpha - u^*_\alpha||_{H^2(D_1)} \\
&\le C(||D_h V_\alpha - u^*_\alpha||_{L^2(D_2)} + ||4\pi W_{h,\ \alpha} D_h V_\alpha - 6\pi V_\alpha^{\frac{1}{2}} u^*_\alpha||_{L^2(D_2)} \\
&\qquad + ||2\alpha(V_{\alpha+h} - V_\alpha)||_{L^2(D_2)} + ||h V_{\alpha+h}||_{L^2(D_2)}) \\
&\le C(||D_h V_\alpha - u^*_\alpha||_{L^2(D_2)} + ||4\pi W_{h,\ \alpha}(D_h V_\alpha - u^*_\alpha)||_{L^2(D_2)} \\
&\quad + ||(4\pi W_{h,\ \alpha} - 6\pi V_\alpha^{\frac{1}{2}}) u^*_\alpha||_{L^2(D_2)} + ||2\alpha(V_{\alpha+h} - V_\alpha)||_{L^2(D_2)} + ||h V_{\alpha+h}||_{L^2(D_2)}).
\end{aligned} \tag{110}$$

step2. 次にこの式の右辺の各項が $h \to 0$ で 0 に収束することを示す. 第 1 項は、補題 7.6 の $D_h V_\alpha \rightharpoonup u^*_\alpha$ in $H^1(\mathbb{R}^3)$ と弱収束することより有界領域では

L^2 強収束し,

$$||D_hV_\alpha - u_\alpha^*||_{L^2(D_2)} \to 0\ (h \to 0).$$

第 2 項は, 補題 7.5 より D_2 上では h によらない定数 C で $4\pi W_{h,\,\alpha}(x) \leq C$ と押さえられるので, 第 1 項と同じく,

$$||4\pi W_{h,\,\alpha}(D_hV_\alpha - u_\alpha^*)||_{L^2(D_2)} \leq C||D_hV_\alpha - u_\alpha^*||_{L^2(D_2)} \to 0\ (h \to 0).$$

第 3 項は, 補題 7.4 より $u_\alpha^* \in C^\infty(\mathbb{R}^3\backslash\{0\})$ なので D_2 上では定数 C で $u_\alpha^*(x) \leq C$ と押さえられ, 補題 7.6 の (105) の $||4\pi W_{h_n,\,\alpha} - 6\pi V_\alpha^{\frac{1}{2}}||_{L^2(K)} \to 0\ (n \to \infty)$ と同様に,

$$||(4\pi W_{h,\,\alpha} - 6\pi V_\alpha^{\frac{1}{2}})u_\alpha^*||_{L^2(D_2)} \leq C||(4\pi W_{h,\,\alpha} - 6\pi V_\alpha^{\frac{1}{2}})||_{L^2(D_2)} \to 0\ (h \to 0).$$

第 4 項は, 命題 7.2(2) の ρ_α の α についての連続性から $V_\alpha = \rho_\alpha^{\frac{2}{3}}$ も α について連続なので, $\lim_{h\to 0}(V_{\alpha+h} - V_\alpha)^2 = 0$. また命題 7.1 より $0 < V_\alpha \leq \min\{\frac{Z}{|x|},\ \frac{9}{\pi^2|x|^4}\} =: M(x)$ なので $|V_{\alpha+h} - V_\alpha|^2 \leq 2(|V_{\alpha+h}|^2 + |V_\alpha|^2) \leq 2M(x)^2 \in L^1(D_2)$ なのでルベーグ収束定理を使うことができ,

$$||2\alpha(V_{\alpha+h} - V_\alpha)||_{L^2(D_2)} \to 0\ (h \to 0).$$

第 5 項は, 命題 7.1 の $0 < V_\alpha \leq \min\{\frac{Z}{|x|},\ \frac{9}{\pi^2|x|^4}\} =: M(x)$ から,

$$||hV_{\alpha+h}||_{L^2(D_2)} \leq |h|||M(x)||_{L^2(D_2)} \to 0\ (h \to 0).$$

(110) の右辺のすべての項が 0 に収束することが以上で確認されたので,

$$\forall D_1 \Subset \forall D_2 \Subset D_r \text{ に対し } ||D_hV_\alpha - u_\alpha^*||_{H^2(D_1)} \to 0\ (h \to 0).$$

$r > 0$ は任意なので,

$$\begin{aligned}&K \subset \mathbb{R}^3\backslash\{0\} \text{ なる任意のコンパクト集合 } K \text{ 上で}\\ &||D_hV_\alpha - u_\alpha^*||_{H^2(K)} \to 0\ (h \to 0).\end{aligned}$$

一般に $H^2(K) \subset C(K)$ なので ([4, Cor. 9. 15]), ある定数 C があって,

$$\begin{aligned}&K \subset \mathbb{R}^3\backslash\{0\} \text{ なる任意のコンパクト集合 } K \text{ 上で},\\ &\max_{x\in K}|D_hV_\alpha(x) - u_\alpha^*(x)| \leq C||D_hV_\alpha - u_\alpha^*||_{H^2(K)} \to 0\ (h \to 0).\end{aligned}$$

よって $\lim_{h\to 0} D_hV_\alpha(x) = \frac{\partial V_\alpha(x)}{\partial\alpha} = u_\alpha^*(x)\ (x \in \mathbb{R}^3\backslash\{0\})$.

補題 7.8 $K \subset \mathbb{R}^3\backslash\{0\}$ なる任意のコンパクト集合 K 上で, $\alpha > 0$, $h \to 0$ で $\max_{x\in K}|u_{\alpha+h}^*(x) - u_\alpha^*(x)| \to 0$. これより各点 $x \in \mathbb{R}^3\backslash\{0\}$ で u_α^* は α について連続である.

(証明) この証明は, 補題 7.5, 補題 7.6, 補題 7.7 と同様の証明を繰り返すことになる,

step1. $0 \leq |h| \leq \frac{\alpha}{2}$ として h によらない定数 C があって, $||u^*_{\alpha+h}||_{H^1(\mathbb{R}^3)} \leq C$ を示す.

$$\int (\nabla u^*_\alpha \cdot \nabla v + \alpha^2 u^*_\alpha v + 6\pi V^{\frac{1}{2}}_\alpha u^*_\alpha v) dx = -\int 2\alpha V_\alpha v dx. \ (\forall v \in H^1(\mathbb{R}^3)). \quad (111)$$

α として $\alpha + h$, v として $u^*_{\alpha+h}$ をとれば,

$$\int |\nabla u^*_{\alpha+h}|^2 + (\alpha+h)^2 (u^*_{\alpha+h})^2 + 6\pi V^{\frac{1}{2}}_{\alpha+h} (u^*_{\alpha+h})^2 dx = -\int 2(\alpha+h) V_{\alpha+h} u^*_{\alpha+h} dx.$$

よって,

$$\min\{1, \ \frac{\alpha^2}{4}\} \int |\nabla u^*_{\alpha+h}|^2 + (u^*_{\alpha+h})^2 dx \leq 3\alpha (\int V^2_{\alpha+h} dx)^{\frac{1}{2}} ||u^*_{\alpha+h}||_{L^2(\mathbb{R}^3)}.$$

命題 7.1 の $0 < V_\alpha \leq \min\{\frac{Z}{|x|}, \ \frac{9}{\pi^2 |x|^4}\} =: M(x)$ から,

$$\min\{1, \ \frac{\alpha^2}{4}\} ||u^*_{\alpha+h}||^2_{H^1(\mathbb{R}^3)} \leq 3\alpha ||M(x)||_{L^2(\mathbb{R}^3)} ||u^*_{\alpha+h}||_{H^1(\mathbb{R}^3)}.$$

補題 7.4 より $u^*_{\alpha+h}(x) < 0$ $(x \in \mathbb{R}^3 \backslash \{0\})$ より $||u^*_{\alpha+h}||_{H^1(\mathbb{R}^3)} > 0$ なので, $||u^*_{\alpha+h}||_{H^1(\mathbb{R}^3)}$ で割って,

$$||u^*_{\alpha+h}||_{H^1(\mathbb{R}^3)} \leq \frac{3\alpha ||M(x)||_{L^2(\mathbb{R}^3)}}{\min\{1, \ \frac{\alpha^2}{4}\}} =: C.$$

step2. $u^*_{\alpha+h} \rightharpoonup u^*_\alpha$ $(h \to 0)$ を示す. $step1$ より $||u^*_{\alpha+h}||_{H^1} \leq C$ なので,

> $m \to \infty$ で $h_m \to 0$ のとき $\exists \{h_n\}^\infty_{n=0} \subset \{h_m\}^\infty_{m=0}$ かつ $\exists \tilde{u} \in H^1(\mathbb{R}^3)$ $s.t.$
> 弱収束 $u^*_{\alpha+h_n} \rightharpoonup \tilde{u}$ in $H^1(\mathbb{R}^3)$.

(111) で α として $\alpha + h_n$, v として $\phi \in C^\infty_c(\mathbb{R}^3 \backslash \{0\})$ をとれば,

$$\begin{aligned} &\int (\nabla u^*_{\alpha+h_n} \cdot \nabla \phi + \ (\alpha+h_n)^2 u^*_{\alpha+h_n} \phi + 6\pi V^{\frac{1}{2}}_{\alpha+h_n} u^*_{\alpha+h_n} \phi) dx \\ &= -\int 2(\alpha+h_n) V_{\alpha+h_n} \phi dx. \end{aligned} \quad (112)$$

$h \to 0$ の極限をとると, 左辺第 1 項, 第 2 項は $u^*_{\alpha+h_n} \rightharpoonup \tilde{u}$ in $H^1(\mathbb{R}^3)$ より,

$$\int (\nabla u^*_{\alpha+h_n} \cdot \nabla \phi + \ (\alpha+h_n)^2 u^*_{\alpha+h_n} \phi dx \to \int (\nabla \tilde{u} \cdot \nabla \phi + \ \alpha^2 \tilde{u} \phi) dx \ (h_n \to 0).$$

右辺はルベーグ収束定理から,

$$-\int 2(\alpha+h_n) V_{\alpha+h_n} \phi dx \to -\int 2\alpha V_\alpha \phi dx \ (h_n \to 0).$$

左辺第 3 項は 2 つに分け, 1 つめは $u^*_{\alpha+h_n} \rightharpoonup \tilde{u}$ in $H^1(\mathbb{R}^3)$ より,

$$\int 6\pi V^{\frac{1}{2}}_{\alpha+h_n} u^*_{\alpha+h_n} \phi dx = \int 6\pi V^{\frac{1}{2}}_{\alpha} u^*_{\alpha+h_n} \phi dx + \int 6\pi (V^{\frac{1}{2}}_{\alpha+h_n} - V^{\frac{1}{2}}_{\alpha}) u^*_{\alpha+h_n} \phi dx,$$
$$\int 6\pi V^{\frac{1}{2}}_{\alpha} u^*_{\alpha+h_n} \phi dx \to \int 6\pi V^{\frac{1}{2}}_{\alpha} \tilde{u} \phi dx,$$
$$\int 6\pi (V^{\frac{1}{2}}_{\alpha+h_n} - V^{\frac{1}{2}}_{\alpha}) u^*_{\alpha+h_n} \phi dx \leq ||6\pi (V^{\frac{1}{2}}_{\alpha+h_n} - V^{\frac{1}{2}}_{\alpha})||_{L^2} ||u^*_{\alpha+h_n} \phi||_{L^2} \to 0.$$

以上より $h \to 0$ の極限をとると, (112) は,

$$\int (\nabla \tilde{u} \cdot \nabla \phi + \ \alpha^2 \tilde{u} \phi + 6\pi V^{\frac{1}{2}}_{\alpha} \tilde{u} \phi) dx = -\int 2\alpha V_\alpha \phi dx.$$

補題 4.20 より $C^\infty_c(\mathbb{R}^3 \setminus \{0\})$ は $H^1(\mathbb{R}^3)$ で稠密なので,

$$\int (\nabla \tilde{u} \cdot \nabla v + \ \alpha^2 \tilde{u} v + 6\pi V^{\frac{1}{2}}_{\alpha} \tilde{u} v) dx = -\int 2\alpha V_\alpha v dx. \ (\forall v \in H^1(\mathbb{R}^3)).$$

解の一意性から $\tilde{u} = u^*_\alpha$ である. 部分列の取り方によらないので, 部分列をとらなくても,

$$u^*_{\alpha+h} \rightharpoonup u^*_\alpha \ (h \to 0).$$

step3. 結論 補題 7.4 より,

$$\int (\nabla u^*_{\alpha+h} \cdot \nabla v + (\alpha + h)^2 u^*_{\alpha+h} v + 6\pi V^{\frac{1}{2}}_{\alpha+h} u^*_{\alpha+h} v) dx$$
$$= -2(\alpha + h) \int V_{\alpha+h} v dx,$$
$$\int (\nabla u^*_\alpha \cdot \nabla v + \alpha^2 u^*_\alpha v + 6\pi V^{\frac{1}{2}}_{\alpha} u^*_\alpha v) dx = -2\alpha \int V_\alpha v dx \ (\forall v \in H^1(\mathbb{R}^3)).$$

辺辺引いて, 移項して,

$$\int (\nabla (u^*_{\alpha+h} - u^*_\alpha) \cdot \nabla v + \alpha^2 (u^*_{\alpha+h} - u^*_\alpha) v dx$$
$$= -(2\alpha h + h^2) \int u^*_{\alpha+h} v dx - 6\pi \int (V^{\frac{1}{2}}_{\alpha+h} u^*_{\alpha+h} - V^{\frac{1}{2}}_{\alpha} u^*_\alpha) v dx$$
$$-2\alpha \int (V_{\alpha+h} - V_\alpha) v dx - 2h \int V_{\alpha+h} v dx. \ (\forall v \in H^1(\mathbb{R}^3)),$$
$$f := -(2\alpha h + h^2) u^*_{\alpha+h} - 6\pi (V^{\frac{1}{2}}_{\alpha+h} u^*_{\alpha+h} - V^{\frac{1}{2}}_{\alpha} u^*_\alpha) - 2\alpha (V_{\alpha+h} - V_\alpha) - 2h V_{\alpha+h}.$$

ここで領域 $D_r := \{x \in \mathbb{R}^3 | 0 < r < |x|\}$, $v \in C^\infty_c(D_r) \subset H^1(\mathbb{R}^3)$ として, $u^*_{\alpha+h} - u^*_\alpha$ が正則性の補題 4.8 の仮定を満たすことを確認する. D_r 上, $u^*_{\alpha+h} - u^*_\alpha$ は $(-\Delta + \alpha^2) u = f$ の弱解 u であり, $\alpha^2 \in L^\infty(D_r)$, 補題 7.4 より, $u^*_{\alpha+h}$, $u^*_\alpha \in H^1(\mathbb{R}^3)$ である. $V^{\frac{1}{2}}_{\alpha+h}$ は D_r 上有界で $u^*_{\alpha+h} \in L^2(D_r)$ であることと, D_r 上 $V_{\alpha+h} \in L^2(D_r)$

であることから $f \in L^2(D_r)$. 以上で正則性の補題 4.8 の仮定は満たされるので以下の結果を得る.

$$
\begin{aligned}
&\forall D_1 \Subset \forall D_2 \Subset D_r \text{ に対し} \exists C s.\,t.\\
&||u^*_{\alpha+h} - u^*_\alpha||_{H^2(D_1)}\\
&\le C(||u^*_{\alpha+h} - u^*_\alpha||_{L^2(D_2)} + (2\alpha h + h^2)||u^*_\alpha||_{L^2(D_2)}\\
&\qquad +(2\alpha h + h^2)||u^*_{\alpha+h} - u^*_\alpha||_{L^2(D_2)} + ||6\pi V^{\frac{1}{2}}_{\alpha+h}(u^*_{\alpha+h} - u^*_\alpha)||_{L^2(D_2)}\\
&\qquad\quad +||6\pi(V^{\frac{1}{2}}_{\alpha+h} - V^{\frac{1}{2}}_\alpha)u^*_\alpha||_{L^2(D_2)} + ||2\alpha(V_{\alpha+h} - V_\alpha)||_{L^2(D_2)}\\
&\qquad\qquad +||2hV_{\alpha+h}||_{L^2(D_2)}).
\end{aligned}
$$

$h \to 0$ で右辺の各項は 0 に収束する. というのは第 1 項, 第 3 項は D_2 上の L^2 強収束 $u^*_{\alpha+h} \to u^*_\alpha$ より 0 に収束. 第 2 項は $u^*_\alpha \in L^2(D_2)$ より 0 に収束. 第 4 項は D_2 上 h によらず $V^{\frac{1}{2}}_{\alpha+h}$ が一様有界なので D_2 上の L^2 強収束 $u^*_{\alpha+h} \to u^*_\alpha$ より 0 に収束. 第 5 項は D_2 上の u^*_α の有界性とルベーグ収束定理より 0 に収束. 第 6 項はルベーグ収束定理より 0 に収束. 第 7 項は D_2 上 h によらず $V_{\alpha+h}$ が一様有界なので 0 に収束するからである. よって,

$$\forall D_1 \Subset \forall D_2 \Subset D_r \text{ に対し } ||u^*_{\alpha+h} - u^*_\alpha||_{H^2(D_1)} \to 0\ (h \to 0).$$

$r > 0$ は任意なので, また 一般に $H^2(K) \subset C(K)$ なので ([4, Cor. 9. 15]), ある定数 C があって,

$$
\begin{aligned}
&K \subset \mathbb{R}^3\backslash\{0\} \text{ なる任意のコンパクト集合 } K \text{ 上で},\\
&\max_{x\in K} |u^*_{\alpha+h}(x) - u^*_\alpha(x)| \le C||u^*_{\alpha+h} - u^*_\alpha||_{H^2(K)} \to 0\ (h \to 0).
\end{aligned}
$$

これより各点 $x \in \mathbb{R}^3\backslash\{0\}$ で u^*_α は α について連続である.

命題 7.2(7) の証明. 補題 7.8 より各点 $x \in \mathbb{R}^3\backslash\{0\}$ で u^*_α は α について連続である.

補題 7.7 より $\lim_{h\to 0} D_h V_\alpha = u^*_\alpha$ なので, また $u^*_\alpha(x) < 0$ なので,

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial \rho_\alpha(x)}{\partial \alpha} &= \frac{\partial (V_\alpha(x)^{\frac{3}{2}})}{\partial \alpha} = \frac{3}{2} V_\alpha(x)^{\frac{1}{2}} \frac{\partial V_\alpha(x)}{\partial \alpha} = \frac{3}{2}\rho_\alpha(x)^{\frac{1}{3}} \lim_{h\to 0} D_h V_\alpha\\
&= \frac{3}{2}\rho_\alpha(x)^{\frac{1}{3}} u^*_\alpha(x) < 0\ (x \in \mathbb{R}^3\backslash\{0\}).
\end{aligned}
$$

これと $\alpha = 0$ での $\rho_\alpha(x)$, λ_α の α についての連続性から, 各点 $x \in \mathbb{R}^3\backslash\{0\}$ で, $\rho_\alpha(x)$ は α について狭義減少関数であり, $\lambda_\alpha := \int \rho_\alpha dx$ も狭義減少関数である.

また ρ_α と u^*_α の α について連続性から $\frac{\partial \rho_\alpha(x)}{\partial \alpha} = \frac{3}{2}\rho_\alpha(x)^{\frac{1}{3}} u^*_\alpha(x)$ は α について連続である. よって各点 $x \in \mathbb{R}^3\backslash\{0\}$ で, $\rho_\alpha(x)$ は α について C^1 級である.

8　定理 2.3($\alpha \to 0$ における漸近挙動) の証明.

8.1　定理 2.3(1) の証明.

定理 2.3(1) の証明. step1. $\alpha > 0$ で $\frac{Z-\lambda_\alpha}{\frac{\alpha^2}{4\pi}} = \int_{\mathbb{R}^3} V_\alpha$ を示す.

$\alpha > 0$ で, 定理 2.1(2) より,

$$V_\alpha(x) := \frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|} - \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\rho_\alpha(y)e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dy \qquad \forall x \in \mathbb{R}^3 \setminus \{0\}. \tag{113}$$

両辺 x で積分し, 正値なのでフビニの定理より積分の順序交換をして,

$$\begin{aligned}\int_{\mathbb{R}^3} V_\alpha(x)dx &= \int_{\mathbb{R}^3} \frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|}dx - \int_{\mathbb{R}^3} \rho_\alpha(y)(\int_{\mathbb{R}^3} \frac{e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dx)dy \\ &= (\int_{\mathbb{R}^3} \frac{e^{-\alpha|x|}}{|x|}dx)(Z - \int_{\mathbb{R}^3} \rho_\alpha(y)dy) \\ &= \frac{4\pi}{\alpha^2}(Z-\lambda_\alpha) = \frac{Z-\lambda_\alpha}{\frac{\alpha^2}{4\pi}}. \end{aligned} \tag{114}$$

step2. 結論

命題 7.2(3) より ρ_α は α について連続なので,

$$\lim_{\alpha\to 0} V_\alpha(x) = \lim_{\alpha\to 0} \rho_\alpha^{\frac{2}{3}}(x) = \rho_0^{\frac{2}{3}}(x) = V_0(x). \tag{115}$$

命題 7.1 より,

$$\rho_\alpha(x) \le \min\{\frac{Z^{\frac{3}{2}}}{|x|^{\frac{3}{2}}}, \frac{27}{\pi^3|x|^6}\} \in L^1(\mathbb{R}^3). \tag{116}$$

(115), (116) からルベーグ収束定理により,

$$\lim_{\alpha\to 0}\int_{\mathbb{R}^3} V_\alpha(x)dx = \int_{\mathbb{R}^3} \lim_{\alpha\to 0} V_\alpha(x)dx = \int_{\mathbb{R}^3} V_0(x)dx = \int_{\mathbb{R}^3} \rho_0^{\frac{2}{3}}(x)dx < \infty. \tag{117}$$

式 (114), (117) より,

$$\lim_{\alpha\to 0} \frac{Z-\lambda_\alpha}{\frac{\alpha^2}{4\pi}} = \int_{\mathbb{R}^3} \rho_0^{\frac{2}{3}}(x)dx < \infty.$$

これより,

$$\lambda_\alpha = Z - \frac{1}{4\pi}\int \rho_0^{\frac{2}{3}}dx\, \alpha^2 + o(\alpha^2).$$

8.2　湯川型ビリアル定理と定理 2.3(2) の証明.

命題 8.1 (湯川型のビリアル定理) *([6, Theorem II. 22, 23] 参考)* $\alpha \ge 0$ とする. E_α のミニマイザーを ρ_α とするとき, 全エネルギーと各エネルギーの関係

は, 次のようになる.

$$\begin{aligned} \mathscr{E}_{\alpha,\ K}(\rho_\alpha) &:= \frac{3}{5}\int \rho_\alpha(x)^{\frac{5}{3}}dx = -E_\alpha + \alpha\frac{dE_\alpha}{d\alpha}, \\ \mathscr{E}_{\alpha,\ A}(\rho_\alpha) &:= -\int \rho_\alpha(x)\frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|}dx = \frac{7}{3}E_\alpha - \frac{1}{3}\alpha\frac{dE_\alpha}{d\alpha}, \\ D_\alpha(\rho_\alpha,\ \rho_\alpha) &:= \frac{1}{2}\int \rho_\alpha(x)\rho_\alpha(y)\frac{e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dxdy = -\frac{1}{3}E_\alpha - \frac{2}{3}\alpha\frac{dE_\alpha}{d\alpha}. \end{aligned}$$

特に, 右辺の α についての連続性から, 各エネルギーは α について連続関数.

(証明) はじめに $\alpha > 0$ として示す. はじめに以下の関係があることを確認しておく.

$$\begin{aligned} &\frac{3}{5}\int \rho_\alpha(x)^{\frac{5}{3}}dx - \int \rho_\alpha(x)\frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|}dx + \frac{1}{2}\int \rho_\alpha(x)\rho_\alpha(y)\frac{e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dxdy \\ &= \mathscr{E}_{\alpha,\ K}(\rho_\alpha) + \mathscr{E}_{\alpha,\ A}(\rho_\alpha) + D_\alpha(\rho_\alpha,\ \rho_\alpha) = E_\alpha. \end{aligned} \tag{118}$$

ρ_α は E_α のミニマイザーなので補題 12.1 より,

$$\lambda_\alpha \epsilon_{\alpha F}(\lambda_\alpha) = \frac{5}{3}\mathscr{E}_{\alpha,\ K}(\rho_\alpha) + \mathscr{E}_{\alpha,\ A}(\rho_\alpha) + 2D_\alpha(\rho_\alpha,\ \rho_\alpha) = 0. \tag{119}$$

$\rho_\alpha(x)$ は E_α のミニマイザーで, $t > 0$ で $\rho_\alpha(tx) \in \mathscr{T}$ より,

$$\frac{d\mathscr{E}_\alpha(\rho_\alpha(tx))}{dt}\Big|_{t=1} = 0. \tag{120}$$

左辺の計算の準備をする.

$$\begin{aligned} \mathscr{E}_\alpha(\rho_\alpha(tx)) &= \mathscr{E}_{\alpha,\ K}(\rho_\alpha(tx)) + \mathscr{E}_{\alpha,\ A}(\rho_\alpha(tx)) + D_\alpha(\rho_\alpha(tx),\ \rho_\alpha(tx)) \\ &= \frac{3}{5}\int \rho_\alpha(tx)^{\frac{5}{3}}dx - \int \rho_\alpha(tx)\frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|}dx \\ &\quad + \frac{1}{2}\int \rho_\alpha(tx)\rho_\alpha(ty)\frac{e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dxdy. \end{aligned}$$

ここで $tx = \tilde{x},\ ty = \tilde{y}$ とおけば,

$$\begin{aligned} \mathscr{E}_\alpha(\rho_\alpha(tx)) &= \frac{3}{5t^3}\int \rho_\alpha(\tilde{x})^{\frac{5}{3}}d\tilde{x} - \frac{1}{t^2}\int \rho_\alpha(\tilde{x})\frac{Ze^{-\frac{\alpha|\tilde{x}|}{t}}}{|\tilde{x}|}d\tilde{x} \\ &\quad + \frac{1}{2t^5}\int \rho_\alpha(\tilde{x})\rho_\alpha(\tilde{y})\frac{e^{-\frac{\alpha|\tilde{x}-\tilde{y}|}{t}}}{|\tilde{x}-\tilde{y}|}d\tilde{x}d\tilde{y}. \end{aligned}$$

これを式 (120) の左辺に代入すれば, 微分と積分の順序交換できることは, ルベーグ収束定理で確認できるので,

$$\begin{aligned} \frac{d\mathscr{E}_\alpha(\rho_\alpha(tx))}{dt}\Big|_{t=1} &= -3\mathscr{E}_{\alpha,\ K}(\rho_\alpha) - 2\mathscr{E}_{\alpha,\ A}(\rho_\alpha) - 5D_\alpha(\rho_\alpha,\ \rho_\alpha) \\ &\quad -\alpha\int Z\rho_\alpha(\tilde{x})e^{-\alpha|\tilde{x}|}d\tilde{x} + \frac{\alpha}{2}\int \rho_\alpha(\tilde{x})\rho_\alpha(\tilde{y})e^{-\alpha|\tilde{x}-\tilde{y}|}d\tilde{x}d\tilde{y}. \end{aligned} \tag{121}$$

ところで命題7.2(2) より, $\frac{dE_\alpha}{d\alpha} = \int Z\rho_\alpha(x)e^{-\alpha|x|}dx - \frac{1}{2}\int \rho_\alpha(x)\rho_\alpha(y)e^{-\alpha|x-y|}dxdy$ なので, 式 (120), (121) から,

$$-3\mathscr{E}_{\alpha,\,K}(\rho_\alpha) - 2\mathscr{E}_{\alpha,\,A}(\rho_\alpha) - 5D_\alpha(\rho_\alpha,\ \rho_\alpha) - \alpha\frac{dE_\alpha}{d\alpha} = 0. \tag{122}$$

式 (119)×3+ 式 (122)− 式 (118) より,

$$\mathscr{E}_{\alpha,\,K}(\rho_\alpha) \quad = \quad -E_\alpha + \alpha\frac{dE_\alpha}{d\alpha}. \tag{123}$$

式 (119)×6+ 式 (122)− 式 (118)×7 より,

$$\mathscr{E}_{\alpha,\,A}(\rho_\alpha) \quad = \quad \frac{7}{3}E_\alpha - \frac{1}{3}\alpha\frac{dE_\alpha}{d\alpha}. \tag{124}$$

式 (119)×3+ 式 (122)×2+ 式 (118) より,

$$D_\alpha(\rho_\alpha,\ \rho_\alpha) \quad = \quad -\frac{1}{3}E_\alpha - \frac{2}{3}\alpha\frac{dE_\alpha}{d\alpha}. \tag{125}$$

最後に命題 7.2(1)(2) より, $\lim_{\alpha\to 0} E_\alpha = E_0$, $\lim_{\alpha\to 0}\frac{dE_\alpha}{d\alpha} = \frac{1}{2}Z^2$ なので式（123)（124)（125) の右辺の $\alpha \to 0$ での極限は, それぞれ $-E_0$, $\frac{7}{3}E_0$, $-\frac{1}{3}E_0$ となる.

定理 2.3(2) の証明. step1. $\frac{d^2E_\alpha}{d\alpha^2}|_{\alpha=0} = -C_3 < 0$ を示す.
但し, $C_3 = Z\int|x|\rho_0(x)dx - \frac{1}{2}\int|x-y|\rho_0(x)\rho_0(y)dxdy$.

命題 7.2 の式 (78), (79) より,

$$\frac{dE_\alpha}{d\alpha}|_\alpha - \frac{dE_\alpha}{d\alpha}|_0 = \int Z\rho_\alpha e^{-\alpha|x|}dx - \frac{1}{2}\int\rho_\alpha(x)\rho_\alpha(y)e^{-\alpha|x-y|}dxdy - \frac{1}{2}Z^2$$
$$= \quad Z\int\rho_\alpha(e^{-\alpha|x|}-1)dx + Z\int\rho_\alpha dx - \frac{1}{2}Z^2$$
$$-\frac{1}{2}\int\rho_\alpha(x)\rho_\alpha(y)(e^{-\alpha|x-y|}-1)dxdy - \frac{1}{2}\int\rho_\alpha(x)\rho_\alpha(y)dxdy.$$

定理 2.3(1) から, $\int\rho_\alpha = \lambda_\alpha = Z - \frac{1}{4\pi}\int\rho_0^{\frac{2}{3}}dx\alpha^2 +_o(\alpha^2)$ なので,

$$\begin{aligned}&\frac{1}{\alpha}(\frac{dE_\alpha}{d\alpha}|_\alpha - \frac{dE_\alpha}{d\alpha}|_0)\\&= Z\int\rho_\alpha(\frac{e^{-\alpha|x|}-1}{\alpha})dx - \frac{1}{2}\int\rho_\alpha(x)\rho_\alpha(y)(\frac{e^{-\alpha|x-y|}-1}{\alpha})dxdy - \frac{1}{2\alpha}Z^2\\&\quad+\frac{Z}{\alpha}(Z - \frac{1}{4\pi}\int\rho_0^{\frac{2}{3}}dx\alpha^2 +_o(\alpha^2)) - \frac{1}{2\alpha}(Z - \frac{1}{4\pi}\int\rho_0^{\frac{2}{3}}dx\alpha^2 +_o(\alpha^2))^2\\&= Z\int\rho_\alpha(\frac{e^{-\alpha|x|}-1}{\alpha})dx - \frac{1}{2}\int\rho_\alpha(x)\rho_\alpha(y)(\frac{e^{-\alpha|x-y|}-1}{\alpha})dxdy + \frac{o(\alpha^2)}{\alpha}.\end{aligned} \tag{126}$$

ルベーグ収束定理が使える条件をチェックする.
命題 7.1 により $\rho_\alpha(x) \le \min\{\frac{Z^{\frac{3}{2}}}{|x|^{\frac{3}{2}}},\ \frac{27}{\pi^3|x|^6}\}$ なので,

$$|\rho_\alpha(\frac{e^{-\alpha|x|}-1}{\alpha})| \le \rho_\alpha\frac{(1-(1-\alpha|x|))}{\alpha} \le \rho_\alpha|x| \le |x|\min\{\frac{Z^{\frac{3}{2}}}{|x|^{\frac{3}{2}}},\ \frac{27}{\pi^3|x|^6}\} \in L^1(\mathbb{R}^3),$$

$$
\begin{aligned}
|\rho_\alpha(x)\rho_\alpha(y)(\frac{e^{-\alpha|x-y|}-1}{\alpha})| &\le \rho_\alpha(x)\rho_\alpha(y)|x-y| \\
&\le \rho_\alpha(x)\rho_\alpha(y)(|x|+|y|) \in L^1(\mathbb{R}^3).
\end{aligned}
$$

命題 7.2 から, 各点 x で ρ_α は α について連続なので,

$$
\begin{aligned}
&\lim_{\alpha\to 0}\rho_\alpha(\frac{e^{-\alpha|x|}-1}{\alpha}) = -|x|\rho_0(x), \\
&\lim_{\alpha\to 0}\rho_\alpha(x)\rho_\alpha(y)(\frac{e^{-\alpha|x-y|}-1}{\alpha}) = -|x-y|\rho_0(x)\rho_0(y).
\end{aligned}
$$

これでルベーグ収束定理が使えることがわかったので, 式 (126) で $\alpha \to 0$ として,

$$
\frac{d^2E_\alpha}{d\alpha^2}|_{\alpha=0} = -Z\int |x|\rho_0(x)dx + \frac{1}{2}\int |x-y|\rho_0(x)\rho_0(y)dxdy =: -C_3.
$$

$\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3$ 空間でほとんどいたるところ $|x-y| < |x|+|y|$ かつ ρ_0 正値なので,

$$
\begin{aligned}
&C_3 = Z\int |x|\rho_0(x)dx - \frac{1}{2}\int |x-y|\rho_0(x)\rho_0(y)dxdy \\
&> Z\int |x|\rho_0(x)dx - \frac{1}{2}\int (|x|+|y|)\rho_0(x)\rho_0(y)dxdy \\
&= Z\int |x|\rho_0(x)dx - Z\int |x|\rho_0(x)dx = 0.
\end{aligned}
$$

step2. 各エネルギーの漸近式を求める.
$step1$ と命題 7.2(2) の $\frac{dE_\alpha}{d\alpha}|_{\alpha=0} = \frac{1}{2}Z^2$ より,

$$
\begin{aligned}
E_\alpha &= E_0 + \frac{1}{2}Z^2\alpha - \frac{1}{2}C_3\alpha^2 + o(\alpha^2), \\
\frac{dE_\alpha}{d\alpha} &= \frac{1}{2}Z^2 - C_3\alpha + o(\alpha).
\end{aligned}
$$

これらを命題 8.1 の 3 式に代入すれば結果を得る.

8.3 定理 2.3(3) の証明.

補題 8.2 $\alpha > 0$ とし, $u^*_\alpha \in H^1(\mathbb{R}^3)$ が

$$
\int(\nabla u^*_\alpha\cdot\nabla v + \alpha^2 u^*_\alpha v + 6\pi V_\alpha^{\frac{1}{2}}u^*_\alpha v)dx = -2\alpha\int V_\alpha v dx. \ (\forall v \in H^1(\mathbb{R}^3)), \quad (127)
$$

を満たすなら,

$$
u^*_\alpha \in H^2(\mathbb{R}^3) \subset L^\infty(\mathbb{R}^3).
$$

特に, $0 < |\tau| < \frac{\alpha}{2}$ とすると τ によらない定数 C_α があって,

$$
||u^*_{\alpha+\tau}||_{L^\infty(\mathbb{R}^3)} \le C_\alpha.
$$

(証明) step1. $u_\alpha^* \in H^1(\mathbb{R}^3)$ に対し $h \neq 0,\ h \in \mathbb{R}^3$ として, $D_h u_\alpha^* := \frac{u_\alpha^*(x+h)-u_\alpha^*(x)}{|h|}$ と定める. $D_{-h}(D_h u_\alpha^*) \in H^1(\mathbb{R}^3)$ より v として $D_{-h}(D_h u_\alpha^*)$ がとれて, $f,\ g \in H^1(\mathbb{R}^3)$ に対し $\nabla D_{-h} g = D_{-h}\nabla g$, $\int f(D_{-h}g)dx = \int (D_h f) g dx$ に注意すれば,

$$\int (|\nabla D_h u_\alpha^*|^2 + \alpha^2 (D_h u_\alpha^*)^2 + 6\pi V_\alpha^{\frac{1}{2}} (D_h u_\alpha^*)^2) dx = -2\alpha \int V_\alpha D_{-h}(D_h u_\alpha^*) dx.$$

よって,

$$\min\{1,\ \alpha^2\} \int (|\nabla D_h u_\alpha^*|^2 + \alpha^2 (D_h u_\alpha^*)^2) dx \leq 2\alpha ||V_\alpha||_{L^2(\mathbb{R}^3)} ||D_{-h}(D_h u_\alpha^*)||_{L^2(\mathbb{R}^3)}.$$

命題 7.1 より $V_\alpha(x) \leq \min\{\frac{Z}{|x|},\ \frac{9}{\pi^2 |x|^4}\} =: M(x) \in L^2(\mathbb{R}^3)$ であり,

$$\min\{1,\ \alpha^2\} ||D_h u_\alpha^*||_{H^1(\mathbb{R}^3)}^2 \leq 2\alpha ||M(x)||_{L^2(\mathbb{R}^3)} ||D_{-h}(D_h u_\alpha^*)||_{L^2(\mathbb{R}^3)}.$$

補題 4.11 より $D_h u_\alpha^* \in H^1(\mathbb{R}^3)$ なので $||D_{-h}(D_h u_\alpha^*)||_{L^2(\mathbb{R}^3)} \leq ||\nabla D_h u_\alpha^*||_{L^2(\mathbb{R}^3)}$, これより,

$$\begin{aligned} \min\{1,\ \alpha^2\} ||D_h u_\alpha^*||_{H^1(\mathbb{R}^3)}^2 &\leq 2\alpha ||M(x)||_{L^2(\mathbb{R}^3)} ||\nabla D_h u_\alpha^*||_{L^2(\mathbb{R}^3)} \\ &\leq 2\alpha ||M(x)||_{L^2(\mathbb{R}^3)} ||D_h u_\alpha^*||_{H^1(\mathbb{R}^3)}. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &\text{よって, } ||D_h u_\alpha^*||_{H^1(\mathbb{R}^3)} \leq \frac{2\alpha ||M(x)||_{L^2(\mathbb{R}^3)}}{\min\{1,\ \alpha^2\}}\ (\forall h \neq 0 \in \mathbb{R}^3) \\ &\text{特に } ||D_h \frac{\partial u_\alpha^*}{\partial x_j}||_{L^2(\mathbb{R}^3)} \leq \frac{2\alpha ||M(x)||_{L^2(\mathbb{R}^3)}}{\min\{1,\ \alpha^2\}}\ (\forall h \neq 0 \in \mathbb{R}^3\ j = 1,\ 2,\ 3) \end{aligned} \tag{128}$$

補題 4.11 より, これから $\frac{\partial u_\alpha^*}{\partial x_i} \in H^1(\mathbb{R}^3)$ $(i = 1,\ 2,\ 3)$. これと $u_\alpha^* \in H^1(\mathbb{R}^3)$ より $u_\alpha^* \in H^2(\mathbb{R}^3)$. さらにソボレフの埋め込み定理から $u_\alpha^* \in H^2(\mathbb{R}^3) \subset L^\infty(\mathbb{R}^3)$ なので α によらない定数 C があって,

$$||u_\alpha^*||_{L^\infty(\mathbb{R}^3)} \leq C ||u_\alpha^*||_{H^2(\mathbb{R}^3)} \tag{129}$$

step2. $u \in H^1(\mathbb{R}^3)$ に対し, ある定数 C があって, $||D_h u||_{L^2(\mathbb{R}^3)} \leq C$ $(\forall h \neq 0 \in \mathbb{R}^3)$ ならば $||\frac{\partial u}{\partial x_i}||_{L^2(\mathbb{R}^3)} \leq C$ $(i = 1,\ 2,\ 3)$ であることを示す. $C_c^\infty(\mathbb{R}^3)$ が $H^1(\mathbb{R}^3)$ で稠密なので, $u \in C_c^\infty(\mathbb{R}^3)$ として示せばよい. $h = te_i$ として $h \to 0$ で $t \to 0$ なので,

$$\lim_{h\to 0} ||D_h u||_{L^2(\mathbb{R}^3)}^2 = \lim_{t \to 0} \int (\frac{u(x+te_i) - u(x)}{t})^2 dx \leq C^2.$$

$u \in C_c^\infty(\mathbb{R}^3)$ なのでルベーグ収束定理が使えて,

$$\lim_{t\to 0} \int (\frac{u(x+te_i) - u(x)}{t})^2 dx = \int (\frac{\partial u}{\partial x_i})^2 dx = ||\frac{\partial u}{\partial x_i}||_{L^2(\mathbb{R}^3)}^2 \leq C^2.$$

step3. (128) に $step2$ の結果を適用し,

$$||\frac{\partial^2 u_\alpha^*}{\partial x_i \partial x_j}||_{L^2(\mathbb{R}^3)} \le \frac{2\alpha||M(x)||_{L^2(\mathbb{R}^3)}}{\min\{1,\ \alpha^2\}}\ (i,\ j = 1,\ 2,\ 3) \tag{130}$$

一方, (127) の v として u_α^* をとれば,

$$\int (|\nabla u_\alpha^*|^2 + \alpha^2 (u_\alpha^*)^2 + 6\pi V_\alpha^{\frac{1}{2}} (u_\alpha^*)^2) dx = -2\alpha \int V_\alpha u_\alpha^* dx.$$

これより $step1$ と同様に計算し,

$$||u_\alpha^*||_{H^1(\mathbb{R}^3)} \le \frac{2\alpha||M(x)||_{L^2(\mathbb{R}^3)}}{\min\{1,\ \alpha^2\}}. \tag{131}$$

(130), (131) から,

$$||u_\alpha^*||^2_{H^2(\mathbb{R}^3)} = ||u_\alpha^*||^2_{H^1(\mathbb{R}^3)} + \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 ||\frac{\partial^2 u_\alpha^*}{\partial x_i \partial x_j}||^2_{L^2(\mathbb{R}^3)} \le 10(\frac{2\alpha||M(x)||_{L^2(\mathbb{R}^3)}}{\min\{1,\ \alpha^2\}})^2. \tag{132}$$

$0 < |\tau| < \frac{\alpha}{2}$ とすれば $\frac{\alpha}{2} < \alpha + \tau < \frac{3\alpha}{2}$ なので, (129), (132) から τ によらない定数 C_α があって,

$$||u_{\alpha+\tau}^*||_{L^\infty(\mathbb{R}^3)} \le C||u_{\alpha+\tau}^*||_{H^2(\mathbb{R}^3)} \le C_\alpha.$$

補題 8.3 $\alpha > 0$ で $\frac{\partial V_\alpha}{\partial \alpha}$ は次を満たす.

$$-\frac{\partial V_\alpha}{\partial \alpha}(x) = Ze^{-\alpha|x|} - \int \rho_\alpha(y) e^{-\alpha|x-y|} dy$$
$$- \int \frac{(-\frac{\partial \rho_\alpha}{\partial \alpha}(y)) e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|} dy\ (x \in \mathbb{R}^3 \setminus \{0\}).$$

$$\text{特に } 0 < -\frac{\partial V_\alpha}{\partial \alpha}(x) < Ze^{-\alpha|x|}\ (\forall \alpha \in (0,\ \infty),\ \forall x \in \mathbb{R}^3 \setminus \{0\}).$$

(証明) 定理 2.1(2) のオイラーラグランジュ方程式から,

$$\begin{aligned} 0 &< \frac{V_\alpha(x) - V_{\alpha+h}(x)}{h} \\ &= \frac{Z}{|x|}(\frac{e^{-\alpha|x|} - e^{-(\alpha+h)|x|}}{h}) - \int \frac{\rho_\alpha(y)e^{-\alpha|x-y|} - \rho_{\alpha+h}(y)e^{-(\alpha+h)|x-y|}}{h|x-y|} dy. \end{aligned} \tag{133}$$

右辺第 2 項に $h \to 0$ でルベーグ収束定理が使えることを確認する. $0 < \theta < 1$ として平均値の定理を使い, $0 < |h| < \frac{\alpha}{2}$ として,

$$\begin{aligned} &\lim_{h \to 0} \frac{\rho_\alpha(y)e^{-\alpha|x-y|} - \rho_{\alpha+h}(y)e^{-(\alpha+h)|x-y|}}{h|x-y|} \\ &= \rho_\alpha(y)e^{-\alpha|x-y|} + \frac{-\frac{\partial \rho_\alpha}{\partial \alpha}(y)e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}, \\ &I := |\frac{\rho_\alpha(y)e^{-\alpha|x-y|} - \rho_{\alpha+h}(y)e^{-(\alpha+h)|x-y|}}{h|x-y|}| \\ &\le |\rho_{\alpha+\theta h}(y)e^{-\alpha+\theta h|x-y|}| + |\frac{(-\frac{\partial \rho_\alpha}{\partial \alpha}|_{\alpha+\theta h}(y))e^{-(\alpha+\theta h)|x-y|}}{|x-y|}|. \end{aligned} \tag{134}$$

命題 7.1 より $V_\alpha(y) \le \min\{\frac{Z}{|y|},\ \frac{9}{\pi^2|y|^4}\} =: M(y)$ なので,

$$|\frac{\partial\rho_\alpha}{\partial\alpha}(y)| = |\frac{3}{2}V_\alpha(y)^{\frac{1}{2}}\frac{\partial V_\alpha}{\partial\alpha}(y)| = \frac{3}{2}V_\alpha(y)^{\frac{1}{2}}|u_\alpha^*(y)| \le \frac{3}{2}M(y)^{\frac{1}{2}}|u_\alpha^*(y)|.$$

これと補題 8.2 から $\theta,\ h$ によらない定数 C_α があって $||u^*_{\alpha+\theta h}||_{L^\infty(\mathbb{R}^3)} \le C_\alpha$ なので,

$$\begin{aligned}\sup_{0\neq h\in(\frac{-\alpha}{2},\ \frac{\alpha}{2})}\ \sup_{0\neq y\in\mathbb{R}^3}(M^{-\frac{1}{2}}(y)|\frac{\partial\rho_{\alpha+\theta h}}{\partial\alpha}(y)|) &\le \sup_{0\neq h\in(\frac{-\alpha}{2},\ \frac{\alpha}{2})}\ \sup_{0\neq y\in\mathbb{R}^3}\frac{3}{2}|u^*_{\alpha+\theta h}(y)| \\ \le \frac{3}{2}\sup_{0\neq h\in(\frac{-\alpha}{2},\ \frac{\alpha}{2})}||u^*_{\alpha+\theta h}||_{L^\infty(\mathbb{R}^3)} &\le \frac{3}{2}C_\alpha. \end{aligned} \tag{135}$$

(134), (135) より,

$$I \le |\rho_{\frac{\alpha}{2}}(y)e^{-\frac{\alpha}{2}|x-y|}| + |\frac{\frac{3}{2}C_\alpha M(y)^{\frac{1}{2}}e^{-\frac{\alpha}{2}|x-y|}}{|x-y|}| \in L^1_y(\mathbb{R}^3).$$

これでルベーグ収束定理が使えるので, (133) で $h \to 0$ として,

$$0 < -\frac{\partial V_\alpha}{\partial\alpha}(x) = Ze^{-\alpha|x|} - \int\rho_\alpha(y)e^{-\alpha|x-y|}dy - \int\frac{(-\frac{\partial\rho_\alpha}{\partial\alpha}(y))e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dy. \tag{136}$$

これから, $-\frac{\partial\rho_\alpha}{\partial\alpha}(y) > 0$ なので,

$$0 < -\frac{\partial V_\alpha}{\partial\alpha} < Ze^{-\alpha|x|}\ (\forall\alpha \in [0,\ \infty),\ \forall x \in \mathbb{R}^3\backslash\{0\})$$

もわかる.

定理 2.3(3) の証明. step1. 命題 7.2(7) より十分小さい $\alpha > 0$ では $\rho_0(x) > \rho_\alpha(x)$ $(x \in \mathbb{R}^3\backslash\{0\})$ なので $V_0(x) = \rho_0(x)^{\frac{2}{3}} > \rho_\alpha(x)^{\frac{2}{3}} = V_\alpha(x)$. よって, 定理 2.1(2) のオイラーラグランジュ方程式から

$$0 < \frac{V_0(x) - V_\alpha(x)}{\alpha} = \frac{1}{\alpha}\{\frac{Z(1-e^{-\alpha|x|})}{|x|} - \int\frac{\rho_0(y) - \rho_\alpha(y)e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dy\}.$$

$Z = \int\rho_0(y)dy$ と $\rho_0(y) - \rho_\alpha(y)e^{-\alpha|x-y|} \ge \rho_0(y)(1 - e^{-\alpha|x-y|})$ から,

$$\begin{aligned} 0 < \frac{V_0(x) - V_\alpha(x)}{\alpha} &\le \int\rho_0(y)\{\frac{(1-e^{-\alpha|x|})}{\alpha|x|} - \frac{(1-e^{-\alpha|x-y|})}{\alpha|x-y|}\}dy \\ &=: \int\rho_0(y)\{f(\alpha|x|) - f(\alpha|x-y|)\}dy. \end{aligned} \tag{137}$$

但し $f(t)$ は次のように定め, $f'(t)$ も定まり,

$$f(t) = \begin{cases}\frac{1-e^{-t}}{t} & (t > 0) \\ 1 & (t = 0)\end{cases},\ f'(t) = \begin{cases}-\frac{1-e^{-t}-te^{-t}}{t^2} & (t > 0) \\ -\frac{1}{2} & (t = 0)\end{cases}.$$

ここで $f'(t)$ は $[0,\ \infty)$ で連続関数で, $\lim_{t\to\infty}f'(t) = 0$ であり, さらに $\frac{-1}{2} \le f'(t) \le 0$ である. なぜなら $1 - e^{-t} - te^{-t} =: g(t)$ とおくと, $g(0) = 0,\ g'(t) =$

$te^{-t} \geq 0$ より $g(t) \geq 0$ なので $f'(t) = \frac{-g(t)}{t^2} \leq 0$ となる. また $g(t) - \frac{1}{2}t^2 =: h(t)$ とおくと $h(0) = 0,\ h'(t) = te^{-t} - t \geq 0$ より $h(t) \leq 0$ なので $0 \leq \frac{-h(t)}{t^2} = f'(t) + \frac{1}{2}$ となるからである. これより $\max_{t \geq 0} |f'(t)| = \frac{1}{2}$ であることに注意して, 平均値の定理で $0 < \theta < 1$ として

$$\begin{aligned} |f(\alpha|x|) - f(\alpha|x-y|)| &= |f'(\alpha|x| + \theta\alpha(|x-y| - |x|))| \cdot \alpha||x| - |x-y|| \\ &\leq \frac{1}{2}\alpha|y|. \end{aligned} \tag{138}$$

(137), (138) から

$$0 < \frac{V_0(x) - V_\alpha(x)}{\alpha} \leq \frac{1}{2}\alpha \int |y|\rho_0(y)dy.$$

命題 7.1 より $0 < |y|\rho_0(y) \leq \min\{\frac{Z^{\frac{3}{2}}}{|y|^{\frac{1}{2}}}, \frac{27}{\pi^3|y|^5}\} \in L^1(\mathbb{R}^3)$ なので $\int |y|\rho_0(y)dy$ は有限値であり, $C_1 := \int |y|\rho_0(y)dy$ とおくと,

$$V_0(x) > V_\alpha(x) \geq V_0(x) - \frac{1}{2}C_1\alpha^2\ (x \in \mathbb{R}^3 \backslash \{0\}).$$

ところで, $V_0 > V_\alpha$ のとき $\frac{V_0 + V_0^{\frac{1}{2}}V_\alpha^{\frac{1}{2}} + V_\alpha}{V_0^{\frac{1}{2}} + V_\alpha^{\frac{1}{2}}} < \frac{3}{2}V_0^{\frac{1}{2}}$ である. なぜなら $p(t) := \frac{3}{2}t - \frac{1+t+t^2}{1+t}$ とおくと, $t > 0$ で $p'(t) = \frac{t^2+2t+3}{2(1+t)^2} > 0$ より $p(t)$ は狭義単調増加関数なので $t > 1$ で $p(t) > p(1) = 0$. $t = \frac{V_0^{\frac{1}{2}}}{V_\alpha^{\frac{1}{2}}} > 1$ をとれば結果を得る, これを使って,

$$0 < \frac{\rho_0(x) - \rho_\alpha(x)}{\alpha^2} = \frac{V_0(x)^{\frac{3}{2}} - V_\alpha(x)^{\frac{3}{2}}}{\alpha^2} = (\frac{V_0(x) - V_\alpha(x)}{\alpha^2})(\frac{V_0(x)^{\frac{3}{2}} - V_\alpha(x)^{\frac{3}{2}}}{V_0(x) - V_\alpha(x)})$$

$$= (\frac{V_0(x) - V_\alpha(x)}{\alpha^2})(\frac{V_0 + V_0^{\frac{1}{2}}V_\alpha^{\frac{1}{2}} + V_\alpha}{V_0^{\frac{1}{2}} + V_\alpha^{\frac{1}{2}}}) < \frac{3}{4}V_0(x)^{\frac{1}{2}}C_1 \int |y|\rho_0(y)dy.$$

よって,

$$\begin{aligned} &\rho_0(x) > \rho_\alpha(x) > \rho_0(x) - \frac{3}{4}C_1V_0(x)^{\frac{1}{2}}\alpha^2\ (x \in \mathbb{R}^3 \backslash \{0\}). \\ &\frac{\partial\rho_\alpha}{\partial\alpha}(x)|_{\alpha=0} = 0\ (x \in \mathbb{R}^3 \backslash \{0\}). \end{aligned}$$

step2. 補題 8.3 と $Z = \int \rho_0(y)dy,\ \rho_0(y) > \rho_\alpha(y)$ から,

$$\begin{aligned} 0 < -\frac{\partial V_\alpha}{\partial\alpha}(x) &< Ze^{-\alpha|x|} - \int \rho_\alpha(y)e^{-\alpha|x-y|}dy \\ &= Ze^{-\alpha|x|} - \int \rho_0(y)e^{-\alpha|x-y|}dy + \int (\rho_0(y) - \rho_\alpha(y))dy \\ &\qquad - \int (\rho_0(y) - \rho_\alpha(y))(1 - e^{-\alpha|x-y|})dy \\ &< \int \rho_0(y)|e^{-\alpha|x|} - e^{-\alpha|x-y|}|dy + \int (\rho_0(y) - \rho_\alpha(y))dy. \end{aligned}$$

定理 2.3(1) より $\int(\rho_0(y)-\rho_\alpha(y))dy = \frac{1}{4\pi}\int \rho_0(x)^{\frac{2}{3}}dx\,\alpha^2 + o(\alpha^2)$. 平均値の定理より $0<\theta<1$ として $|e^{-\alpha|x|}-e^{-\alpha|x-y|}| = \alpha e^{-(\alpha|x|+\theta\alpha(|x-y|-|x|)}\,|\,|x|-|x-y|\,| \leq \alpha|y|$ なので,

$$0 < -\frac{\partial V_\alpha}{\partial\alpha}(x) < \alpha(C_1 + \frac{1}{4\pi}\int \rho_0(x)^{\frac{2}{3}}dx\alpha + o(\alpha)).$$

よって α を十分小さくとれば,

$$0 < -\frac{\partial V_\alpha}{\partial\alpha}(x) \leq C_1\alpha \ (x \in \mathbb{R}^3\backslash\{0\}).$$

これより $0 > \frac{\partial\rho_\alpha}{\partial\alpha}(x) = \frac{3}{2}V_\alpha^{\frac{1}{2}}\frac{\partial V_\alpha}{\partial\alpha}(x) > \frac{3}{2}V_0^{\frac{1}{2}}\frac{\partial V_\alpha}{\partial\alpha}(x) = \frac{3}{2}\rho_0^{\frac{1}{3}}\frac{\partial V_\alpha}{\partial\alpha}(x)$ なので,

$$0 > \frac{\partial\rho_\alpha}{\partial\alpha}(x) > -\frac{3}{2}C_1\rho_0^{\frac{1}{3}}(x)\alpha \ (x \in \mathbb{R}^3\backslash\{0\}),$$
$$\lim_{\alpha\to 0}\frac{\partial\rho_\alpha}{\partial\alpha}(x) = 0 \ (x \in \mathbb{R}^3\backslash\{0\}).$$

9 定理 2.4($\alpha \to \infty$ における漸近挙動) の証明.

定理 2.4(1) と定理 2.4(2) の証明.

定理 2.1(1) より,

$$\rho_\alpha^{\frac{2}{3}}(x) = \frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|} - \int\frac{\rho_\alpha(y)e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dy.$$

となる. これより,

$$\frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|} > \rho_\alpha^{\frac{2}{3}}(x). \tag{139}$$

この 2 式から, そして次に補題 4.13 から,

$$\begin{aligned}
\rho_\alpha^{\frac{2}{3}}(x) &> \frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|} - \int\frac{Z^{\frac{3}{2}}e^{-\frac{3}{2}\alpha|y|}}{|y|^{\frac{3}{2}}}\frac{e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dy \\
&= \frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|} - \int\frac{Z^{\frac{3}{2}}e^{-\frac{3}{2}\alpha|y|}}{|y|^{\frac{3}{2}}}\frac{dy}{\alpha|x||y|\max\{\frac{e^{\alpha|x|}}{\sinh(\alpha|y|)}, \frac{e^{\alpha|y|}}{\sinh(\alpha|x|)}\}} \\
&\geq \frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|} - \frac{Z^{\frac{3}{2}}e^{-\alpha|x|}}{|x|}\int\frac{e^{-\frac{3}{2}\alpha|y|}\sinh(\alpha|y|)dy}{\alpha|y|^{\frac{5}{2}}} \\
&= \frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|} - \frac{Z^{\frac{3}{2}}e^{-\alpha|x|}}{|x|}\frac{C_4}{\alpha^{\frac{3}{2}}}.
\end{aligned} \tag{140}$$

但し, $C_4 := \int\frac{e^{-\frac{3}{2}|x|}\sinh(|x|)}{|x|^{\frac{5}{2}}}dx$. 式 (139) (140) より, 以下 $C_4 < \alpha^{\frac{3}{2}}$ として,

$$(\frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|})^{\frac{3}{2}} > \rho_\alpha(x) > (\frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|})^{\frac{3}{2}}(1-\frac{Z^{\frac{1}{2}}C_4}{\alpha^{\frac{3}{2}}})^{\frac{3}{2}}. \tag{141}$$

特に $\alpha\to\infty$ で,

$$\rho_\alpha(x)=(\frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|})^{\frac{3}{2}}(1+O(\frac{1}{\alpha^{\frac{3}{2}}})).$$

式（141) を $\mathbb{R}^3$ で積分すれば,

$$2(\frac{2\pi Z}{3\alpha})^{\frac{3}{2}}>\lambda_\alpha>2(\frac{2\pi Z}{3\alpha})^{\frac{3}{2}}(1-\frac{Z^{\frac{1}{2}}C_4}{\alpha^{\frac{3}{2}}})^{\frac{3}{2}}.$$

特に $\alpha\to\infty$ で,

$$\lambda_\alpha=2(\frac{2\pi Z}{3\alpha})^{\frac{3}{2}}+O(\frac{1}{\alpha^3}).$$

定理 2.4(3) の証明.

定理 2.4(1) から, $Z_\alpha^*:=Z(1-\frac{Z^{\frac{1}{2}}C_4}{\alpha^{\frac{3}{2}}})$ とおけば,

$$(\frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|})^{\frac{3}{2}}>\rho_\alpha(x)>(\frac{Z_\alpha^*e^{-\alpha|x|}}{|x|})^{\frac{3}{2}}. \tag{142}$$

これより, $\mathscr{E}_{\alpha,\,K}(\rho_\alpha)$ は,

$$\frac{3}{5}\int(\frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|})^{\frac{5}{2}}dx>\mathscr{E}_{\alpha,\,K}(\rho_\alpha)>\frac{3}{5}\int(\frac{Z_\alpha^*e^{-\alpha|x|}}{|x|})^{\frac{5}{2}}dx.$$

変数変換 $\alpha x=y$ を行い,

$$\frac{3}{5}\frac{Z^{\frac{5}{2}}\alpha}{\alpha^{\frac{3}{2}}}\int\frac{e^{-\frac{5}{2}|y|}}{|y|^{\frac{5}{2}}}dy>\mathscr{E}_{\alpha,\,K}(\rho_\alpha)>\frac{3}{5}\frac{(Z_\alpha^*)^{\frac{5}{2}}\alpha}{\alpha^{\frac{3}{2}}}\int\frac{e^{-\frac{5}{2}|y|}}{|y|^{\frac{5}{2}}}dy.$$

$C_5:=\frac{2}{5}\int\frac{e^{-\frac{5}{2}|y|}}{|y|^{\frac{5}{2}}}dy$ とおけば,

$$\frac{3C_5Z^{\frac{5}{2}}}{2\alpha^{\frac{1}{2}}}>\mathscr{E}_{\alpha,\,K}(\rho_\alpha)>\frac{3C_5(Z_\alpha^*)^{\frac{5}{2}}}{2\alpha^{\frac{1}{2}}}=\frac{3C_5Z^{\frac{5}{2}}}{2\alpha^{\frac{1}{2}}}(1-\frac{Z^{\frac{1}{2}}C_4}{\alpha^{\frac{3}{2}}})^{\frac{5}{2}}.$$

$\alpha\to\infty$ で,

$$\mathscr{E}_{\alpha,\,K}(\rho_\alpha)=\frac{3C_5Z^{\frac{5}{2}}}{2\alpha^{\frac{1}{2}}}+O(\frac{1}{\alpha^2}). \tag{143}$$

式 (142) より $\mathscr{E}_{\alpha,\,A}(\rho_\alpha)$ は,

$$-\int(\frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|})^{\frac{3}{2}}\frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|}dx<\mathscr{E}_{\alpha,\,A}(\rho_\alpha)<-\int(\frac{Z_\alpha^*e^{-\alpha|x|}}{|x|})^{\frac{3}{2}}\frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|}dx.$$

$\mathscr{E}_{\alpha,\,K}(\rho_\alpha)$ と同様に計算し,

$$\mathscr{E}_{\alpha,\,A}(\rho_\alpha)=-\frac{5C_5Z^{\frac{5}{2}}}{2\alpha^{\frac{1}{2}}}+O(\frac{1}{\alpha^2}). \tag{144}$$

式 (142) より $D_\alpha(\rho_\alpha,\ \rho_\alpha)$ は,

$$\frac{1}{2}\int(\frac{Ze^{-\alpha|x|}}{|x|})^{\frac{3}{2}}(\frac{Ze^{-\alpha|y|}}{|y|})^{\frac{3}{2}}\frac{e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dxdy > D_\alpha(\rho_\alpha,\ \rho_\alpha)$$
$$> \frac{1}{2}\int(\frac{Z_\alpha^* e^{-\alpha|x|}}{|x|})^{\frac{3}{2}}(\frac{Z_\alpha^* e^{-\alpha|y|}}{|y|})^{\frac{3}{2}}\frac{e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dxdy.$$

変数変換 $\alpha x = z,\ \alpha y = w$ を行い, $C_6 := \frac{1}{2}\int(\frac{e^{-|z|}}{|z|})^{\frac{3}{2}}(\frac{e^{-|w|}}{|w|})^{\frac{3}{2}}\frac{e^{-|z-w|}}{|z-w|}dzdw$ とおけば, $(\frac{e^{-|z|}}{|z|})^{\frac{3}{2}} \in L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3)$ より補題 4.14 から $C_6 < \infty$ であり,

$$\frac{C_6 Z^3}{\alpha^2} > D_\alpha(\rho_\alpha,\ \rho_\alpha) > \frac{C_6(Z_\alpha^*)^3}{\alpha^2} = \frac{C_6 Z^3}{\alpha^2}(1-\frac{Z^{\frac{1}{2}}C_4}{\alpha^{\frac{3}{2}}})^3,$$

$$D_\alpha(\rho_\alpha,\ \rho_\alpha) = \frac{C_6 Z^3}{\alpha^2} + O(\frac{1}{\alpha^{\frac{7}{2}}}). \tag{145}$$

$E_\alpha = \mathscr{E}_{\alpha,\ K}(\rho_\alpha) + \mathscr{E}_{\alpha,\ A}(\rho_\alpha) + D_\alpha(\rho_\alpha,\ \rho_\alpha)$ なので式 (143), (144), (145) から,

$$E_\alpha = -\frac{C_5 Z^{\frac{5}{2}}}{\alpha^{\frac{1}{2}}} + O(\frac{1}{\alpha^2}). \tag{146}$$

命題 8.1 のビリアル定理より, $\frac{dE_\alpha}{d\alpha} = \frac{1}{\alpha}(\mathscr{E}_{\alpha,\ K}(\rho_\alpha) + E_\alpha)$ なので, 式 (143), (146) より,

$$\frac{dE_\alpha}{d\alpha} = \frac{C_5 Z^{\frac{5}{2}}}{2\alpha^{\frac{3}{2}}} + O(\frac{1}{\alpha^3}).$$

10　定理 2.5 の証明.

(証明) step1.　(1) の $\rho_\alpha(x)$ $(x \in \mathbb{R}^3\backslash\{0\})$ についての証明. 命題 7.2(7) と命題 7.2(7) より $0 \le \alpha$ で $\rho_\alpha(x)$ は α について狭義単調減少. 定理 2.4(1) より $\alpha \to \infty$ で $\rho_\alpha(x) \to 0$. 命題 7.2(7) と定理 2.3(3) より $0 \le \alpha$ で $\rho_\alpha(x)$ は α について C^1 級.

step2.　(1) の λ_α についての証明. 命題 7.2(7) と命題 7.2(7) より $0 \le \alpha$ で λ_α は α について狭義単調減少. 定理 2.4(2) より $\lambda \to \infty$ で $\lambda_\alpha \to 0$. 命題 7.2(3) より $0 \le \alpha$ で λ_α は α について連続. $\alpha > 0$ で,

$$\lim_{h\to 0}\frac{\lambda_{\alpha+h}-\lambda_\alpha}{h} = \lim_{h\to 0}\int\frac{\rho_{\alpha+h}-\rho_\alpha}{h}dx.$$

ここでルベーグ収束定理が成り立つことを確認する. 命題 7.2(7) より ρ_α は微分可能で, 平均値の定理から $0 < \theta < 1$ として,

$$\lim_{h\to 0}\frac{\rho_{\alpha+h}-\rho_\alpha}{h} = \frac{\partial\rho_\alpha}{\partial\alpha},\ \frac{\rho_{\alpha+h}-\rho_\alpha}{h} = \frac{\partial\rho_\alpha}{\partial\alpha}\Big|_{\alpha=\alpha+\theta h}.$$

命題 7.1 の $V_\alpha(x) \le \min\{\frac{Z}{|x|}, \frac{9}{\pi^2|x|^4}\} =: M(x) \in L^2(\mathbb{R}^3)$ と補題 8.3 より,

$$0 < -\frac{\partial \rho_\alpha}{\partial \alpha}\Big|_{\alpha=\alpha+\theta h} = \frac{3}{2}V_{\alpha+\theta h}^{\frac{1}{2}}\Big(-\frac{\partial V_\alpha}{\partial \alpha}\Big|_{\alpha=\alpha+\theta h}\Big) \le \frac{3}{2}M(x)^{\frac{1}{2}}Ze^{-\frac{\alpha}{2}|x|} \in L^1(\mathbb{R}^3).$$

以上よりルベーグ収束定理が使えて,

$$\lim_{h\to 0}\frac{\lambda_{\alpha+h}-\lambda_\alpha}{h} = \lim_{h\to 0}\int \frac{\rho_{\alpha+h}-\rho_\alpha}{h}dx = \int \frac{\partial \rho_\alpha}{\partial \alpha}dx.$$

これで $\frac{\partial \lambda_\alpha}{\partial \alpha}$ の存在がわかった. 最後に $\frac{\partial \lambda_\alpha}{\partial \alpha}$ の連続性を確認する. 今と同様にルベーグ収束定理が使えるので,

$$\lim_{h\to 0}\frac{\partial \lambda_\alpha}{\partial \alpha}\Big|_{\alpha=\alpha+h} = \lim_{h\to 0}\int \frac{\partial \rho_\alpha}{\partial \alpha}\Big|_{\alpha=\alpha+h}dx = \int \frac{\partial \rho_\alpha}{\partial \alpha}\Big|_{\alpha=\alpha}dx = \frac{\partial \lambda_\alpha}{\partial \alpha}\Big|_{\alpha=\alpha}.$$

step3. (1) の E_α についての証明. 命題 7.2(5) より $0 \le \alpha$ で $\rho_\alpha(x)$ は α について狭義単調減少で C^1 級. 命題 7.2(1) より $\alpha \to \infty$ で $\rho_\alpha(x) \to 0$.

step4. (1) の $\mathscr{E}_{\alpha,\,K}(\rho_\alpha)$ についての証明. 命題 7.2(7) と命題 7.2(7) より $0 \le \alpha$ で $\rho_\alpha(x)^{\frac{5}{3}}$ は α について狭義単調減少. これよりで $\mathscr{E}_{\alpha,\,K}(\rho_\alpha) = \frac{3}{5}\int \rho_\alpha(x)^{\frac{5}{3}}dx$ も狭義単調減少. 定理 2.4(3) より $\alpha \to \infty$ で $\mathscr{E}_{\alpha,\,K}(\rho_\alpha) \to 0$.

$0 \le \alpha$ で命題 7.2(2) より $\lim_{h\to 0}\rho_{\alpha+h}^{\frac{5}{3}}(x) = \rho_\alpha^{\frac{5}{3}}(x)$, また命題 7.1 より $\rho_{\alpha+h}^{\frac{5}{3}}(x) \le \min\{\frac{Z^{\frac{5}{2}}}{|x|^{\frac{5}{2}}}, \frac{3^5}{\pi^5|x|^{10}}\} =: M(x)^{\frac{5}{2}} \in L^1(\mathbb{R}^3)$ なのでルベーグ収束定理が使えて,

$$\lim_{h\to 0}\frac{3}{5}\int \rho_{\alpha+h}(x)^{\frac{5}{3}}dx = \frac{3}{5}\int \rho_\alpha(x)^{\frac{5}{3}}dx.$$

よって $0 \le \alpha$ で $\mathscr{E}_{\alpha,\,K}(\rho_\alpha)$ は α について連続.

$0 \le \alpha$ で

$$\lim_{h\to 0}\frac{\mathscr{E}_{\alpha+h,\,K}(\rho_{\alpha+h})-\mathscr{E}_{\alpha,\,K}(\rho_\alpha)}{h} = \lim_{h\to 0}\frac{3}{5}\int \frac{\rho_{\alpha+h}^{\frac{5}{3}}-\rho_\alpha^{\frac{5}{3}}}{h}dx.$$

ここでルベーグ収束定理が成り立つことを確認する. 命題 7.2(7) より ρ_α は微分可能で, 平均値の定理から $0 < \theta < 1$ として,

$$\lim_{h\to 0}\frac{3}{5}\frac{\rho_{\alpha+h}^{\frac{5}{3}}-\rho_\alpha^{\frac{5}{3}}}{h} = \rho_\alpha^{\frac{2}{3}}\frac{\partial \rho_\alpha}{\partial \alpha},\quad \frac{3}{5}\frac{\rho_{\alpha+h}^{\frac{5}{3}}-\rho_\alpha^{\frac{5}{3}}}{h} = \rho_{\alpha+\theta h}^{\frac{2}{3}}\frac{\partial \rho_\alpha}{\partial \alpha}\Big|_{\alpha=\alpha+\theta h}.$$

命題 7.1 の $V_\alpha(x) \le \min\{\frac{Z}{|x|}, \frac{9}{\pi^2|x|^4}\} =: M(x) \in L^{\frac{3}{2}}(\mathbb{R}^3)$ と補題 8.3 より,

$$0 < -\rho_{\alpha+\theta h}^{\frac{2}{3}}\frac{\partial \rho_\alpha}{\partial \alpha}\Big|_{\alpha=\alpha+\theta h} = V_{\alpha+\theta h}^{\frac{3}{2}}\Big(-\frac{\partial V_\alpha}{\partial \alpha}\Big|_{\alpha=\alpha+\theta h}\Big) \le M(x)^{\frac{3}{2}} \in L^1(\mathbb{R}^3).$$

以上よりルベーグ収束定理が使えて,

$$\lim_{h\to 0}\frac{\mathscr{E}_{\alpha+h,\,K}(\rho_{\alpha+h})-\mathscr{E}_{\alpha,\,K}(\rho_\alpha)}{h} = \lim_{h\to 0}\frac{3}{5}\int \frac{\rho_{\alpha+h}^{\frac{5}{3}}-\rho_\alpha^{\frac{5}{3}}}{h}dx = \int \rho_\alpha^{\frac{2}{3}}\frac{\partial \rho_\alpha}{\partial \alpha}dx.$$

これで $\frac{\partial \mathscr{E}_{\alpha,\,K}(\rho_\alpha)}{\partial\alpha}$ の存在がわかった. 最後に $0 \leq \alpha$ での $\frac{\partial \mathscr{E}_{\alpha,\,K}(\rho_\alpha)}{\partial\alpha}$ の連続性を確認する. 今と同様にルベーグ収束定理が使えるので,

$$\begin{aligned}\lim_{h\to 0} \frac{\partial \mathscr{E}_{\alpha,\,K}(\rho_\alpha)}{\partial\alpha}\Big|_{\alpha=\alpha+h} &= \lim_{h\to 0}\int \rho_{\alpha+h}^{\frac{2}{3}} \frac{\partial \rho_\alpha}{\partial\alpha}\Big|_{\alpha=\alpha+h} dx = \int \rho_\alpha^{\frac{2}{3}} \frac{\partial \rho_\alpha}{\partial\alpha}\Big|_{\alpha=\alpha} dx \\ &= \frac{\partial \mathscr{E}_{\alpha,\,K}(\rho_\alpha)}{\partial\alpha}\Big|_{\alpha=\alpha}.\end{aligned}$$

step5.　(1) の $-\mathscr{E}_{\alpha,\,A}(\rho_\alpha)$ についての証明. 命題 7.2(7) と命題 7.2(7) より $0 \leq \alpha$ で $\frac{Z\rho_\alpha(x)e^{-\alpha|x|}}{|x|}$ は α について狭義単調減少. これより $-\mathscr{E}_{\alpha,\,A}(\rho_\alpha) = \int \frac{Z\rho_\alpha(x)e^{-\alpha|x|}}{|x|}dx$ も狭義単調減少. 定理 2.4(3) より $\alpha \to \infty$ で $-\mathscr{E}_{\alpha,\,A}(\rho_\alpha) \to 0$.

*step*3, *step*4 から $0 \leq \alpha$ で, E_α, $\mathscr{E}_{\alpha,\,K}(\rho_\alpha)$ は α について C^1 級. このこととビリアル定理の命題 8.1 の第 1 式から $\alpha\frac{dE_\alpha}{d\alpha}$ は $0 \leq \alpha$ で α について C^1 級. このこととビリアル定理の命題 8.1 の第 2 式から $-\mathscr{E}_{\alpha,\,A}(\rho_\alpha)$ は $0 \leq \alpha$ で α について C^1 級.

step6.　(1) の $D_\alpha(\rho_\alpha,\ \rho_\alpha)$ についての証明. 命題 7.2(7) と命題 7.2(7) より $0 \leq \alpha$ で $\frac{\rho_\alpha(x)\rho_\alpha(y)e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}$ は α について狭義単調減少. これより $D_\alpha(\rho_\alpha,\ \rho_\alpha) = \frac{1}{2}\int \frac{\rho_\alpha(x)\rho_\alpha(y)e^{-\alpha|x-y|}}{|x-y|}dxdy$ も狭義単調減少. 定理 2.4(3) より $\alpha \to \infty$ で $D_\alpha(\rho_\alpha,\ \rho_\alpha) \to 0$.

*step*3, *step*4 から $0 \leq \alpha$ で, E_α, $\mathscr{E}_{\alpha,\,K}(\rho_\alpha)$ は α について C^1 級. このこととビリアル定理の命題 8.1 の第 1 式から $\alpha\frac{dE_\alpha}{d\alpha}$ は $0 \leq \alpha$ で α について C^1 級. このこととビリアル定理の命題 8.1 の第 3 式から $D_\alpha(\rho_\alpha,\ \rho_\alpha)$ は $0 \leq \alpha$ で α について C^1 級.

step7. (2) の証明. 命題 7.2(6) より E_α は α について狭義凸関数. 定理 2.3(2) と定理 2.4(3) より, $-E_{\alpha,\,A}$ と $D_\alpha(\rho_\alpha,\ \rho_\alpha)$ は $\alpha \to 0$ でも $\alpha \to \infty$ でも α について狭義凸な関数に漸近していく. 定理 2.3(2) と定理 2.4(3) より, λ_α と $E_{\alpha,\,K}$ は $\alpha \to 0$ では α について狭義凹な関数に漸近していき, $\alpha \to \infty$ では α について狭義凸な関数に漸近していく.

step8. (3) の証明. $\alpha \to 0$ のときのエネルギー比は定理 2.3(2) による. $\alpha \to \infty$ のときのエネルギー比は定理 2.4(3) による.

11　定理 3.1(BTF 模型のミニマイザーの一意存在と基本的性質) の証明.

11.1　定理 3.1(1) の証明.

(証明) step1. E_R は下限を持つことを示す. $\forall\rho \in \mathscr{T}_R$ で, ヘルダーの不等式より,

$$\begin{aligned}\mathscr{E}(\rho) &\geq \frac{3}{5}\int \rho^{\frac{5}{3}} - \int \frac{Z\rho\chi_{B(R)}(x)}{|x|} \\ &\geq \frac{3}{5}\int \rho^{\frac{5}{3}} - \left(\int \left(\frac{Z\chi_{B(R)}(x)}{|x|}\right)^{\frac{5}{2}}\right)^{\frac{2}{5}}\left(\int \rho^{\frac{5}{3}}\right)^{\frac{3}{5}}.\end{aligned}$$

右辺第 2 項で $Ry = x$ とし $\int (\frac{Z\chi_{B(R)}(x)}{|x|})^{\frac{5}{2}} dx = Z^{\frac{5}{2}} R^{\frac{1}{2}} \int_{B(1)} \frac{1}{|y|^{\frac{5}{2}}} dy =: Z^{\frac{5}{2}} R^{\frac{1}{2}} C'$ となる. これを使い, 次にヤングの不等式を使い,

$$\begin{aligned}\mathscr{E}(\rho) &\geq \frac{3}{5}\int \rho^{\frac{5}{3}} - (Z^{\frac{5}{2}} R^{\frac{1}{2}} C')^{\frac{2}{5}} (\int \rho^{\frac{5}{3}})^{\frac{3}{5}} \\ &\geq \frac{3}{5}\int \rho^{\frac{5}{3}} - \{\frac{3}{5}\epsilon^{\frac{5}{3}}(\int \rho^{\frac{5}{3}}) + \frac{2}{5}(C' \frac{Z^{\frac{5}{2}} R^{\frac{1}{2}}}{\epsilon^{\frac{5}{2}}})\}.\end{aligned}$$

$\epsilon^{\frac{5}{3}} = \frac{1}{2}$ とし,

$$\mathscr{E}(\rho) \geq \frac{3}{10}\int \rho^{\frac{5}{3}} - CZ^{\frac{5}{2}} R^{\frac{1}{2}} \geq -CZ^{\frac{5}{2}} R^{\frac{1}{2}} \quad \forall \rho \in \mathscr{T}. \tag{147}$$

ここで C は $Z,\ R$ によらない定数. これより $E_R \geq -CZ^{\frac{5}{2}} R^{\frac{1}{2}}$.

step2.

*step*1 より $\mathscr{E}(\rho_1) \geq \mathscr{E}(\rho_2) \geq \cdots \to E_R$ となる最小化列 $\{\rho_n\}_{n=1}^{\infty} \subset \mathscr{T}_R$ がある. $\{\rho_n\}_{n=1}^{\infty}$ は *step*1 より $\mathscr{E}(\rho_1) \geq \mathscr{E}(\rho_n) \geq \frac{3}{10}\int \rho_n^{\frac{5}{3}} - CZ^{\frac{5}{2}} R^{\frac{1}{2}}$ なので, $L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3)$ 有界列である. これより部分列（部分列も $\{\rho_n\}_{n=1}^{\infty}$ で表記する）$\{\rho_n\}_{n=1}^{\infty} \subset \mathscr{T}_R$ と $\rho_0 \in L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3)$ が存在し $\rho_n \rightharpoonup \rho_0$ と $L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3)$ で弱収束する. 以上は補題 4.18(2) の仮定を満たすので, $\rho_0 \in \mathscr{T}_R,\ E_R = \lim_{n\to\infty} \mathscr{E}(\rho_n) \geq \mathscr{E}(\rho_0)$. 逆に $\rho_0 \in \mathscr{T}_R$ より $\mathscr{E}(\rho_0) \geq E_R$. 以上より ρ_0 は E_R のミニマイザー ρ_R である.

step3. ミニマイザーの一意性と $\rho_R(x)$ が $|x|$ の関数であることを背理法で示す.

一意性を示す. ρ について $\int \rho^{\frac{5}{3}} dx$ は狭義凸関数, $\int \frac{\rho(x) Z\chi_{B(R)}}{|x|} dx$ は広義凸関数 ([6, 定理 2. 6]). また補題 4.16(3) から $D(\rho,\ \rho)$ は狭義凸関数. これらから $\mathscr{E}(\rho)$ は狭義凸性を持つ. ミニマイザーが ρ_0 と σ_0 と 2 つあれば, $\frac{\rho_0+\sigma_0}{2} \in \mathscr{T}_R$ かつ狭義凸性より $\frac{\mathscr{E}(\rho_0)+\mathscr{E}(\sigma_0)}{2} > \mathscr{E}(\frac{\rho_0+\sigma_0}{2})$ となり矛盾.

次に $\rho(x)$ は $|x|$ の関数である. もしそうでないと, エネルギー汎関数の回転対称性から, $\rho(x)$ を直交変換したものもミニマイザーとなり, 一意性と矛盾する.

11.2 定理 3.1(2) の証明.

次の 4 つの補題 11.1, 11.2, 11.3, 11.4 を使って定理 3.1(2) が示される.

補題 11.1 *([10, 113page] にあるが入手しづらいと思うので証明を与える)*
$k \in \mathbb{N},\ x,\ y \in \mathbb{R}^3 \setminus \{0\}$ ならば,

$$\frac{\{|x|^k + |y|^k\}}{\max\{|x|,\ |y|\}} \geq (|x|^{k-1} + |y|^{k-1})(1 - \frac{1}{k}).$$

(証明) $x,\ y$ の対称性から $|x| \geq |y| > 0$ として示せばよい.

$$
\begin{aligned}
S: &= \frac{\{|x|^k + |y|^k\}}{\max\{|x|,\ |y|\}} - (|x|^{k-1} + |y|^{k-1})(1 - \frac{1}{k}) \\
&= |x|^{k-1} + \frac{|y|^k}{|x|} - (|x|^{k-1} + |y|^{k-1})(1 - \frac{1}{k}) \\
&= \frac{1}{k}\{|x|^{k-1} + \frac{k|y|^k}{|x|} - (k-1)|y|^{k-1}\}. \qquad (148)
\end{aligned}
$$

相加相乗平均 $(a_1 + \cdots + a_k) \geq k(a_1 \cdots a_k)^{\frac{1}{k}}$ で, $a_1 = |x|^{k-1},\ a_2 = a_3 = \cdots = a_k = \frac{|y|^k}{|x|}$ とすれば,

$$
|x|^{k-1} + \frac{(k-1)|y|^k}{|x|} \geq k\{|x|^{k-1}(\frac{|y|^k}{|x|})^{k-1}\}^{\frac{1}{k}} = k|y|^{k-1}. \qquad (149)
$$

(148), (149) より,

$$
S: \ \geq \ \frac{1}{k}\{k|y|^{k-1} + \frac{|y|^k}{|x|} - (k-1)|y|^{k-1}\} = \frac{1}{k}(|y|^{k-1} + \frac{|y|^k}{|x|}) \geq 0.
$$

補題 11.2 *([10, 113page] にあるが入手しづらいと思うので証明を与える)*
E_R のミニマイザーを ρ_R とし,

$$
\Big(\rho_R(x)^{\frac{2}{3}} - \frac{Z}{|x|} + \int \rho_R(y)\frac{1}{|x-y|}dy\Big)\rho_R(x) = 0 \qquad (a.\,e.\ x \in B(R)). \qquad (150)
$$

また,

$$
Z \geq \int \rho_R(x)dx. \qquad (151)
$$

(証明) step1. (150) を導く. $\phi \in C_c^\infty(B(R)),\ s \in (-\epsilon,\ \epsilon)$ とし, $\epsilon > 0$ が十分小さければ, $\rho_R(1 + s\phi) \in \mathscr{T}_R$ なので, $\frac{d}{ds}\mathscr{E}(\rho_R(1 + s\phi))|_{s=0} = 0$ より,

$$
\int (\rho_R(x)^{\frac{2}{3}} - \frac{Z}{|x|} + \int \rho_R(y)\frac{1}{|x-y|}dy)\rho_R(x)\phi(x)dx = 0 \qquad \forall\phi \in C_c^\infty(B(R)).
$$

これより,

$$
(\rho_R(x)^{\frac{2}{3}} - \frac{Z}{|x|} + \int \rho_R(y)\frac{1}{|x-y|}dy)\rho_R(x) = 0 \qquad (a.\,e.\ x \in B(R)). \qquad (152)
$$

step2. (151) を導く. (152) より, また補題 4.13 を使って,

$$
\begin{aligned}
\frac{Z}{|x|}\rho_R(x) &= \rho_R(x)^{\frac{5}{3}} + \int \rho_R(y)\frac{1}{|x-y|}dy\rho_R(x) \\
&\geq \int \rho_R(y)\frac{1}{|x-y|}dy\rho_R(x) = \int \rho_R(y)\frac{1}{\max\{|x|,\ |y|\}}dy\rho_R(x).
\end{aligned}
$$

$|x|^k$ $(k \in \mathbb{N})$ をかけて積分し,

$$
\begin{aligned}
Z\int \rho_R(x)|x|^{k-1}dx &\geq \int \frac{\rho_R(x)\rho_R(y)|x|^k}{\max\{|x|,\ |y|\}}dxdy \\
&= \frac{1}{2}\int \frac{\rho_R(x)\rho_R(y)\{|x|^k + |y|^k\}}{\max\{|x|,\ |y|\}}dxdy.
\end{aligned}
$$

補題 11.1 より, $\frac{\{|x|^k+|y|^k\}}{\max\{|x|,\ |y|\}} \geq (|x|^{k-1}+|y|^{k-1})(1-\frac{1}{k})$ なので,

$$\begin{aligned} Z\int \rho_R(x)|x|^{k-1}dx &\geq (1-\frac{1}{k})\frac{1}{2}\int \rho_R(x)\rho_R(y)(|x|^{k-1}+|y|^{k-1})dxdy \\ &= (1-\frac{1}{k})\int \rho_R(y)dy\int \rho_R(x)|x|^{k-1}dx. \end{aligned}$$

両辺を有限正値である $\int \rho_R(x)|x|^{k-1}dx$ で割り, $k \to \infty$ とすれば,

$$Z \geq \int \rho_R(x)dx.$$

補題 11.3 E_R のミニマイザーを ρ_R とし,

$$\rho_R(x)^{\frac{2}{3}} - \frac{Z}{|x|} + \int \rho_R(y)\frac{1}{|x-y|}dy \geq 0 \quad (a.\,e.\, x \in B(R)).$$

(証明) $f \in \mathscr{T}_R,\ t > 0$ とすれば, $\rho_R + tf \in \mathscr{T}_R$ より,
$\frac{d}{dt}\mathscr{E}(\rho_R + tf)|_{t=0} \geq 0$ なので,

$$\int(\rho_R(x)^{\frac{2}{3}} - \frac{Z}{|x|} + \int_{\mathbb{R}^3}\rho_R(y)\frac{1}{|x-y|}dy)f(x)dx \geq 0, \\ \forall f \in \mathscr{T}_R. \tag{153}$$

$A := \{x \in B(R)|\rho_R(x)^{\frac{2}{3}} - \frac{Z}{|x|} + \int \rho_R(y)\frac{dy}{|x-y|} < 0\}$ とおくと, $|A| = 0$. なぜなら $|A| > 0$ とすると, f として特性関数 χ_A がとれて $\int(\rho_R(x)^{\frac{2}{3}} - \frac{Z}{|x|} + \int \rho_R(y)\frac{1}{|x-y|}dy)\chi_A(x)dx < 0$ となり, (153) と矛盾するから. これより,

$$\rho_R(x)^{\frac{2}{3}} - \frac{Z}{|x|} + \int \rho_R(y)\frac{1}{|x-y|}dy \geq 0 \quad (a.\,e.\, x \in B(R)).$$

補題 11.4 E_R のミニマイザーを ρ_R とし,

$$V_R(x) := \frac{Z}{|x|} - \int \rho_R(y)\frac{1}{|x-y|}dy \geq 0 \quad (x \in B(R) \setminus \{0\}).$$

(証明) step1. $\partial B(R)$ で $V_R(x) \geq 0$ を示す. 背理法. $\rho_R(x)$ が球対称なので, $V_R(x)$ も球対称であることに注意すると, $\partial B(R)$ で $V_R(x) \geq 0$ の否定は, $\partial B(R)$ で $V_R(x) < 0$ となる. 補題 4.17 より $V_R(x)$ は $\mathbb{R}^3 \setminus \{0\}$ で連続なので,

$$\exists r_0 < R\ s.\,t.\ V_R(x) = \frac{Z}{|x|} - \int \rho_R(y)\frac{1}{|x-y|}dy < 0\ \forall x\ (r_0 < |x| < R).$$

このとき補題 11.2 の $(\rho_R(x)^{\frac{2}{3}} - \frac{Z}{|x|} + \int \rho_R(y)\frac{1}{|x-y|}dy)\rho_R(x) = 0$ より,

$$\rho_R(x) = 0\ (a.\,e.\, x \in \{x|r_0 < |x| < R\}).$$

よって $r_0 < |x| < R$ では,

$$\begin{aligned} V_R(x) &= \frac{Z}{|x|} - \int \frac{\rho_R(y)}{|x-y|}dy = \frac{Z}{|x|} - \int \frac{\rho_R(y)}{\max\{|x|,\ |y|\}}dy \\ &= \frac{Z}{|x|} - \int_{|y|\leq r_0} \frac{\rho_R(y)}{\max\{|x|,\ |y|\}}dy = \frac{Z - \int \rho_R(y)dy}{|x|} \geq 0. \end{aligned}$$

最後の不等式は補題 11.2 の $Z \geq \int \rho_R(y)dy$ によるが, これは $r_0 < |x| < R$ で $V_R(x) < 0$ に矛盾する.

step2. $V_R(x) \geq 0$ $(x \in B(R) \setminus \{0\})$ を示す. $A := \{x \in B(R) \setminus \{0\} | V_R(x) < 0\}$ が空集合であることを示せばよい. 補題 4.17 より, $V_R \in C(\mathbb{R}^3 \setminus \{0\})$ なので

$$A \text{ は有界開集合.} \tag{154}$$

また補題 4.2 より $\int \frac{\rho_{\mathrm{R}}(y)}{|x-y|}dy$ は有界なので, $x = 0$ のある近傍で $V_R > 0$. これより $\mathrm{dist}\{0,\ A\} > 0$. これより $\bar{A} \subset \mathbb{R}^3 \setminus \{0\}$ なので,

$$V_R(x) \in C(\bar{A}). \tag{155}$$

A 上では $V_R = \frac{Z}{|x|} - \int \frac{\rho_R(y)}{|x-y|}dy < 0$ なので, A 上では $\rho_R^{\frac{2}{3}} - \frac{Z}{|x|} + \int \frac{\rho_R}{|x-y|}dy > 0$. これと補題 11.2 から, A 上では $\rho_R = 0$ となる. このことと補題 4.17 から,

$$-\Delta(-V_R) = 4\pi\rho_R = 0 \ \text{ in } \ \mathcal{D}'(A). \tag{156}$$

弱最大値原理の補題 4.3 の仮定を, (154), (155), (156) が満たすので,

$$\max_{\bar{A}}(-V_R) \leq \max_{\partial A}(-V_R). \tag{157}$$

$\partial A \cap \partial B(R)$ では $step1$ より $(-V_R) \leq 0$, また $\partial A \cap B(R) \setminus \{0\}$ では $V_R(x)$ の連続性, A が開集合, $\mathrm{dist}\{0,\ A\} > 0$ から, $V_R(x) = 0$ on $\partial A \cap B(R) \setminus \{0\}$ なので,

$$\max_{\bar{A}}(-V_R) \leq 0. \tag{158}$$

これは A が空集合を意味する.

定理 3.1(2) の証明. $Z \geq \int \rho_R dx$ はすでに補題 11.2 で示されている. あとはオイラーラグランジュ方程式を導けばよい.

$\rho_R \neq 0$ の場合. 補題 11.2 から,

$$\rho_R(x)^{\frac{2}{3}} - \frac{Z}{|x|} + \int \frac{\rho_R(y)}{|x-y|}dy = 0 \qquad (a.\ e.\ x \in B(R) \cap \{x | \rho_R(x) \neq 0\}).$$

$\rho_R = 0$ の場合. 補題 11.3, 11.4 から,

$$\rho_R(x)^{\frac{2}{3}} - \frac{Z}{|x|} + \int \frac{\rho_R(y)}{|x-y|}dy = 0 \qquad (a.\ e.\ x \in B(R) \cap \{x | \rho_R(x) = 0\}).$$

補題 4.17 より $\frac{Z}{|x|} - \int \frac{\rho_R(y)}{|x-y|}dy$ は $\mathbb{R}^3 \setminus \{0\}$ で連続なので, （必要なら $\rho_R(x)$ の測度 0 の部分で値をとりなおして）

$$\rho_R(x)^{\frac{2}{3}} - \frac{Z}{|x|} + \int \frac{\rho_R(y)}{|x-y|}dy = 0 \qquad (B(R) \setminus \{0\}). \tag{159}$$

11.3 定理 3.1(3) の証明.

(証明) step1. $\rho_R,\ V_R \in C(B(R)\backslash\{0\})$ を示す.

補題 4.17 より $V_R = \frac{Z}{|x|} - \int \frac{\rho_R(y)}{|x-y|}dy$ は $\mathbb{R}^3\backslash\{0\}$ で連続, $B(R)\backslash\{0\}$ では $\rho_R = V_R^{\frac{3}{2}}$ より, ρ_R も $B(R)\backslash\{0\}$ で連続.

step2. $\rho_R,\ V_R \in C^1(B(R)\backslash\{0\})$ を示す. $\rho_R,\ V_R$ は球対称なので $\rho_R(r),\ V_R(r)$ とも書くことにする.

補題 4.13 より,

$$V_R(r) = \frac{Z}{r} - \frac{1}{r}\int_0^r 4\pi s^2 \rho_R(s)ds - \int_r^R 4\pi s^2 \frac{\rho_R(s)}{s}ds \text{ in } B(R) \setminus \{0\}. \tag{160}$$

$\rho_R \in C(B(R)\backslash\{0\})$ から, $\rho_R(s) \in C((0,\ R))$ なので式（160) から $V_R(r) \in C^1((0,\ R))$, よって $V_R \in C^1(B(R)\backslash\{0\})$. これから $\rho_R \in C^1(B(R)\backslash\{0\})$.

step3. $n \in \mathbb{N}$ で $\rho_R,\ V_R \in C^n(B(R)\backslash\{0\}) \to \rho_R,\ V_R \in C^{n+1}(B(R)\backslash\{0\})$ を示す.

$\rho_R \in C^n(B(R)\backslash\{0\})$ から, $\rho_R(s) \in C^n((0,\ R))$ なので式 (160) から $V_R(r) \in C^{n+1}((0,\ R))$, よって $V_R \in C^{n+1}(B(R)\backslash\{0\})$. これから $\rho_R \in C^{n+1}(B(R)\backslash\{0\})$.

11.4 定理 3.1(4) の証明.

(証明) step1. $V_R(x) > 0$ かつ $\rho_R(x) > 0 \quad (\forall x \in B(R) \setminus \{0\})$ を示す.

$0 < r < R$ なる任意の r に対し $U_r := \{x | r < |x| < R\}$ とおく. U_r で $V_R > 0$ を示せばよい.

補題 4.17 と定理 3.1(3) より,

$$\text{有界連結開集合 } U_r \text{で},\ V_R \in C^2(U_r) \cap C(\bar{U}_r). \tag{161}$$

補題 4.17 より

$$-\Delta(-V_R) \leq 4\pi\rho_R = 4\pi V_R^{\frac{1}{2}} V_R \text{ in } U_r.$$

$4\pi V_R^{\frac{1}{2}}$ は $\bar{U}_r$ で連続なので最大値 $\gamma \geq 0$ を持つので,

$$-\Delta(-V_R) \leq 4\pi\rho_R \leq \gamma V_R \text{ in } U_r.$$

よって,

$$(-\Delta + \gamma)(-V_R) \leq 0,\ \gamma \geq 0 \text{ in } U_r. \tag{162}$$

ここから背理法で $V_R > 0$ in U_r を示す. すでに補題 11.4 より $V_R \geq 0$ in U_r がわかっているので, 結論を否定して $\bar{U}_r$ の内点 x_0 で $V_R(x) = 0$ とすれば,

$$\bar{U}_r \text{の内点 } x_0 \text{で} - V_R \text{は最大値 } 0 \text{ をとる}. \tag{163}$$

強最大値原理の補題 4.5 の仮定を (161), (162), (163) は満たすので,

$$V_R(x) \equiv 0 \text{ in } \bar{U}_r.$$

ところがこれは $\rho_R(x) \equiv 0$ in $B(R)$ を意味する. つまりミニマイザー $\rho_R \equiv 0$ となり, $E_R = 0$ となる. しかし明らかに $E_R < 0$ なので矛盾する.

step2. $p \le 1$ 及び $q \le \frac{3}{2}$ として $0 < |x| < R$ で $|x|^p V_R(x)$, $|x|^q \rho_R(x)$ は $|x|$ について狭義減少関数となることを示す. (160) より $B(R)\backslash\{0\}$ で,

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial r}(r^p V_R(r)) &= \frac{\partial}{\partial r}(Zr^{p-1} - r^{p-1}\int_0^r 4\pi s^2 \rho_R(s)ds - r^p \int_r^R 4\pi s^2 \frac{\rho_R(s)}{s}ds) \\ &= (p-1)r^{p-2}(Z - \int_0^r 4\pi s^2 \rho_R(s)ds) - pr^{p-1}\int_r^R 4\pi s^2 \frac{\rho_R(s)}{s}ds.\end{aligned}$$

補題 11.2 から $Z - \int_0^r 4\pi s^2 \rho_R(s)ds \ge 0$ なので, $p \le 1$ ならば, $|x|^p V_R(x)$ は $|x|$ について狭義減少関数. 一般に $f(x)$ が狭義減少関数なら $f(x)^{\frac{3}{2}}$ も狭義減少関数なので, $q \le \frac{3}{2}$ ならば, $|x|^q \rho_R(x)$ も $|x|$ について狭義減少関数.

step3. $p \le 1$ 及び $q \le \frac{3}{2}$ として $0 < |x| < R$ で $|x|^p V_R(x)$, $|x|^q \rho_R(x)$ は $|x|$ について狭義凸関数となる.

補題 4.17 と, $V_R,\ \rho_R \in C^\infty(B(R)\backslash\{0\})$ から, $\Delta V_R(r) = 4\pi\rho_R(r)$ in $B(R)\backslash\{0\}$ より,

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2}(rV_R(r)) = r\frac{\partial^2 V_R(r)}{\partial r^2} + 2\frac{\partial V_R(r)}{\partial r} = r\Delta V_R(r) = 4\pi r \rho_R > 0. \tag{164}$$

次に

$$\begin{aligned}&\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r^p V_R(r)) = \frac{\partial^2}{\partial r^2}\{r^{p-1}(rV_R(r))\} \\ &= r^{p-1}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(rV_R(r)) + 2(p-1)r^{p-2}\frac{\partial}{\partial r}(rV_R(r)) + (p-1)(p-2)r^{p-3}(rV_R(r)).\end{aligned} \tag{165}$$

(164) より第 1 項は正, $p \le 1$ なら $step2$ から $\frac{\partial}{\partial r}(rV_R(r)) < 0$ なので第 2 項も非負, $p \le 1$ なら第 3 項も非負. よって $p \le 1$ で $|x|^p V_{\mathrm{R}}(x)$ は $|x|$ について狭義凸関数となる. 一般に C^2 級の $f(x)$ が狭義凸関数なら $f(x)^{\frac{3}{2}}$ も狭義凸関数なので, $q \le \frac{3}{2}$ で $|x|^q \rho_R(x)$ は $|x|$ について狭義凸関数.

12 定理 3.2(BTF 模型の L^1 ノルム制限付き変分問題の基本定理) の証明.

12.1 定理 3.2(1) の証明.

(証明) step1. $E_R(\lambda) \ge \mathscr{E}(\rho_0)$ を示す.

定理 3.1(1) より $E_R(\lambda) \geq E_R > -\infty$ から, $\mathscr{E}(\rho_1) \geq \mathscr{E}(\rho_2) \geq \cdots \to E_R(\lambda)$ となる最小化列 $\{\rho_n\} \subset \mathscr{T}_{R\partial\lambda}$ がある. $\{\rho_n\}$ は定理 3.1(1) の証明の中の式 (147) より $\mathscr{E}(\rho_1) \geq \mathscr{E}(\rho_n) \geq \frac{3}{10}\int \rho_n^{\frac{5}{3}} - CZ^{\frac{5}{2}}R^{\frac{1}{2}}$ なので, $L^{\frac{5}{3}}(B(R))$ 有界列である. これより部分列（部分列も $\{\rho_n\}$ で表記する）$\{\rho_n\} \subset \mathscr{T}_{R\partial\lambda} \subset \mathscr{T}_R$ と $\rho_0 \in L^{\frac{5}{3}}(B(R))$ が存在し $\rho_n \rightharpoonup \rho_0$ と $L^{\frac{5}{3}}(B(R))$ で弱収束する. 以上は補題 4.18(2) の仮定を満たすので, $\rho_0 \in \mathscr{T}_R,\ E_R(\lambda) = \lim_{n\to\infty} \mathscr{E}(\rho_n) \geq \mathscr{E}(\rho_0)$.

step2. $\rho_0 \in \mathscr{T}_{R\partial\lambda}$ を示せば $E_R(\lambda) \leq \mathscr{E}(\rho_0)$ となり, $step1$ の結果とあわせて ρ_0 は $E_R(\lambda)$ のミニマイザーとなるのでこれを示す.

すでに $step1$ で $\rho_0 \in \mathscr{T}_R$ までわかっているので, $||\rho_o||_{L^1(B(R))} = \lambda$ を示せばよい. $\{\rho_n\} \subset L^{\frac{5}{3}}(B(R)),\ \rho_0 \in L^{\frac{5}{3}}(B(R)),\ \rho_n \rightharpoonup \rho_0$ in $L^{\frac{5}{3}}(B(R))$ と弱収束するのでマツァの補題 4.7 より,

$$\exists\{F_n\}_{n=1}^{\infty} \subset L^{\frac{5}{3}}(B(R)),\ \exists\{C_{ni} \mid i,\ n \in \mathbb{N},\ 1 \leq i \leq n,\ C_{ni} \geq 0,\ \Sigma_{i=1}^{n} C_{ni} = 1\}$$
$$s.t.\ \text{強収束}\ F_n \to \rho_0 \text{ in } L^{\frac{5}{3}}(B(R)),\ F_n = \Sigma_{i=1}^{n} C_{ni}\rho_i.$$

これより,

$$||F_n||_{L^1(B(R))} = \int_{B(R)} F_n dx = \Sigma_{i=1}^{n} C_{ni} \int_{B(R)} \rho_i dx = (\Sigma_{i=1}^{n} C_{ni})\lambda = \lambda\ (\forall n). \quad (166)$$

また

$$\begin{aligned} |\ ||F_n||_{L^1(B(R))} - ||\rho_0||_{L^1(B(R))}\ | &\leq ||F_n - \rho_0||_{L^1(B(R))} = \int_{B(R)} |F_n - \rho_0| dx \\ &\leq ||F_n - \rho_0||_{L^{\frac{5}{3}}(B(R))} |B(R)|^{\frac{2}{5}} \to 0\ (n \to 0). \end{aligned} \quad (167)$$

(166), (167) から $||\rho_0||_{L^1(B(R))} = \lim_{n\to\infty} ||F_n||_{L^1(B(R))} = \lambda$.

step3. ミニマイザー $\rho_{R,\ \lambda}$ の一意性と $|x|$ の関数であることをを背理法で示す.

$\mathscr{E}(\rho)$ は狭義凸性を持つので, ミニマイザーが ρ_0 と σ_0 と 2 つあれば, $\frac{\rho_0+\sigma_0}{2} \in \mathscr{T}_{R,\ \lambda}$ かつ狭義凸性より $\frac{\mathscr{E}(\rho_0)+\mathscr{E}(\sigma_0)}{2} > \mathscr{E}(\frac{\rho_0+\sigma_0}{2})$ となり矛盾.

次に $\rho_{R,\ \lambda}(x)$ は $|x|$ の関数である. もしそうでないと, エネルギー汎関数の回転対称性から, $\rho_{R,\ \lambda}(x)$ を直交変換したものもミニマイザーとなり, 一意性と矛盾する.

12.2 定理 3.2(2) の証明.

(証明) step1. 任意の $\lambda \geq 0$ で, $E_R(\lambda)$ は狭義凸関数であることを示す.

$0 \leq \lambda_1 < \lambda_2,\ 0 < \alpha < 1$ に対し, $E_R(\lambda_1),\ E_R(\lambda_2)$ のミニマイザーを $\sigma_1,\ \sigma_2$ と

すると, $\mathscr{E}(\rho)$ の狭義凸性から

$$\begin{aligned}\alpha E_R(\lambda_1) + (1-\alpha)E_R(\lambda_2) &= \alpha\mathscr{E}_R(\sigma_1) + (1-\alpha)\mathscr{E}_R(\sigma_2)\\ &> \mathscr{E}_R(\alpha\sigma_1 + (1-\alpha)\sigma_2)\\ &\geq \inf\{\mathscr{E}_R(\rho)|\rho \in \mathscr{T}_R,\ ||\rho||_{L^1(\mathbb{R}^3)} = \alpha\lambda_1 + (1-\alpha)\lambda_2\}\\ &= E_R(\alpha\lambda_1 + (1-\alpha)\lambda_2)).\end{aligned}$$

step2. $0 \leq \lambda \leq \lambda_R$ で狭義減少関数, $\lambda \geq \lambda_R$ で狭義増加関数であることを示す.

背理法. $0 \leq \lambda \leq \lambda_R$ で結論を否定すれば, $0 \leq \lambda_1 < \lambda_2 \leq \lambda_R$ なのに $E_R(\lambda_1) \leq E_R(\lambda_2)$ となる λ_1, λ_2 がある. $E_R(\lambda_R)$ が全体の一意的な最小値なので, $E_R(\lambda_1) \leq E_R(\lambda_2) > E_R(\lambda_R)$. これは狭義凸性に矛盾する.

$\lambda \geq \lambda_R$ で結論を否定すれば, $\lambda_R \leq \lambda_1 < \lambda_2$ なのに $E_R(\lambda_1) \geq E_R(\lambda_2)$ となる λ_1, λ_2 がある. $E_R(\lambda_R)$ が全体の一意的な最小値なので, $E_R(\lambda_R) < E_R(\lambda_1) \geq E_R(\lambda_2)$. これは狭義凸性に矛盾する.

12.3 定理 3.2(3) の証明.

補題 12.1 $\lambda > 0$ で, $\rho_{R,\ \lambda}$ が $E_R(\lambda)$ のミニマイザーならば

$$\rho_{R,\ \lambda}^{\frac{2}{3}}(x) = \max\{\frac{Z}{|x|} - \int \frac{\rho_{R,\ \lambda}(y)}{|x-y|}dy + \epsilon_{RF}(\lambda),\ 0\}\ (x \in\ B(R)\backslash\{0\}).$$

$$\text{但し}\epsilon_{RF}(\lambda) := \frac{1}{\lambda}\int \rho_{R,\ \lambda}(x)(\rho_{R,\ \lambda}^{\frac{2}{3}} - \frac{Z}{|x|} + \int \frac{\rho_{R,\ \lambda}(y)}{|x-y|}dy)dx.$$

(証明) step1. 準備.

$\rho_{R,\ \lambda}$, $g \in \mathscr{T}_{R\partial\lambda}$ および $0 < t < 1$ に対し $\rho_t := (1-t)\rho_{R,\ \lambda} + tg \in \mathscr{T}_{R\partial\lambda}$ であり,

$$\begin{aligned}\mathscr{E}(\rho_t) = \frac{3}{5}\int |\rho_{R,\ \lambda} + t(g-\rho_{R,\ \lambda})|^{\frac{5}{3}}dx - \int \frac{(\rho_{R,\ \lambda} + t(g-\rho_{R,\ \lambda}))Z}{|x|}dx\\ +\frac{1}{2}\int \frac{(\rho_{R,\ \lambda} + t(g-\rho_{R,\ \lambda}))(x)(\rho_{R,\ \lambda} + t(g-\rho_{R,\ \lambda}))(y)}{|x-y|}dxdy,\end{aligned}$$

$$\frac{d\mathscr{E}(\rho_t)}{dt}|_{t=0+} = \int(\rho_{R,\ \lambda}^{\frac{2}{3}}(x) - \frac{Z}{|x|} + \int \frac{\rho_{R,\ \lambda}(y)}{|x-y|}dy)(g(x) - \rho_{R,\ \lambda}(x))dx, \tag{168}$$

$$= \int(\rho_{R,\ \lambda}^{\frac{2}{3}}(x) - \frac{Z}{|x|} + \int \frac{\rho_{R,\ \lambda}(y)}{|x-y|}dy - \epsilon_{RF}(\lambda))g(x)dx. \tag{169}$$

但し, $\epsilon_{RF}(\lambda) := \frac{1}{\lambda}\int \rho_{R,\ \lambda}(x)(\rho_{R,\ \lambda}^{\frac{2}{3}} - \frac{Z}{|x|} + \int \frac{\rho_{R,\ \lambda}(y)}{|x-y|}dy)dx$.

step2.

$\rho_{R,\ \lambda}$ はミニマイザーなので $0 < t < 1$ に対し $\mathscr{E}(\rho_{R,\ \lambda}) \leq \mathscr{E}(\rho_t)$, $\frac{d\mathscr{E}(\rho_t)}{dt}|_{t=0+} \geq 0$ となる. $step1$ の式（169) より $\forall g \in \mathscr{T}_{R\partial\lambda}$ に対し
$\int(\rho_{R,\ \lambda}(x)^{\frac{2}{3}} - \frac{Z}{|x|} + \int\frac{\rho_{R,\ \lambda}(y)}{|x-y|}dy - \epsilon_{RF}(\lambda))g(x)dx \geq 0$ となる. これより,

$$\rho^{\frac{2}{3}}_{R,\ \lambda}(x) - \frac{Z}{|x|} + \int\frac{\rho_{R,\ \lambda}(y)}{|x-y|}dy - \epsilon_{RF}(\lambda) \geq 0\ (a.\ e.\ x \in B(R)). \tag{170}$$

なぜなら, そうでないとすると $|A| := \{x \in B(R)|\rho^{\frac{2}{3}}_{R,\ \lambda} - \frac{Z}{|x|} + \int\frac{\rho_{R,\ \lambda}(y)}{|x-y|}dy - \epsilon_{RF} < 0\}| \neq 0$ となり, $g := \frac{\lambda}{|A|}\chi_A \in \mathscr{T}_{R\partial\lambda}$ として, $\int\frac{\lambda}{|A|}\chi_A(\rho^{\frac{2}{3}}_{R,\ \lambda} - \frac{Z}{|x|} + \int\frac{\rho_{R,\ \lambda}(y)}{|x-y|}dy - \epsilon_{RF}) < 0$ となり矛盾するからである.

$\epsilon_{RF}(\lambda) = \frac{1}{\lambda}\int\rho_{R,\ \lambda}(x)(\rho^{\frac{2}{3}}_{R,\ \lambda} - \frac{Z}{|x|} + \int\frac{\rho_{R,\ \lambda}(y)}{|x-y|}dy)dx$ と $\lambda = \int\rho_{R,\ \lambda}$ から,
$\int(\rho^{\frac{2}{3}}_{R,\ \lambda} - \frac{Z}{|x|} + \rho_{R,\ \lambda} * \frac{1}{|x|} - \epsilon_{RF})\rho_{R,\ \lambda}dx = 0$ となる. さらに,

$$\int_{\{\rho_{R,\ \lambda}>0\}}(\rho^{\frac{2}{3}}_{R,\ \lambda}(x) - \frac{Z}{|x|} + \rho_{R,\ \lambda} * \frac{1}{|x|} - \epsilon_{RF})\rho_{R,\ \lambda}dx = 0. \tag{171}$$

式（170)（171) より,

$$\rho^{\frac{2}{3}}_{R,\ \lambda}(x) - \frac{Z}{|x|} + \rho_{R,\ \lambda} * \frac{1}{|x|} - \epsilon_{RF} = 0\ (a.\ e.\ x \in \{\rho_{R,\ \lambda} > 0\} \cap B(R)). \tag{172}$$

これから,

$$\rho^{\frac{2}{3}}_{R,\ \lambda}(x) = \max\{\frac{Z}{|x|} - \int\frac{\rho_{R,\ \lambda}(y)}{|x-y|}dy + \epsilon_{RF},\ 0\} \text{ in } B(R)\backslash\{0\}. \tag{173}$$

なぜなら $\rho_{R,\ \lambda}(x) > 0$ の場合は, 式（172) より, $\rho_{R,\ \lambda}(x) = 0$ の場合は, 式（170) によるからである. 補題 4.17 より右辺は連続なので式（173) は $B(R)\backslash\{0\}$ で成立する.

定理 3.2(3) の証明. step1. $E_R(\lambda)$ は $0 \leq \lambda < \infty$ で連続関数であることを示す.

まず $E_R(\lambda)$ は $0 < \lambda < \infty$ で連続関数であることを示す. 一般に $\Omega \in \mathbb{R}^n$ を開集合とし, $f : \Omega \to \mathbb{R}$ が凸関数ならば, 連続関数である ([5, Section2. 1] 参照). 定理 3.2(2) より, 開集合 $0 < \lambda < \infty$ で $E_R(\lambda)$ は凸関数なので連続関数となる.

次に $E_R(\lambda)$ は $\lambda = 0$ で連続であることを示す.

$E_R(\lambda)$ は $[0,\ \lambda_R]$ で減少関数で $E_R(0) = 0$ なので, $[0,\ \lambda_R]$ で $0 \geq E_R(\lambda)$. このことと定理 3.1(1) の証明 $step1$ の (147) から, λ によらない定数を C として,

$$C \geq C + E_R(\lambda) \geq \frac{3}{10}\int\rho^{\frac{5}{3}}_{R,\ \lambda}dx\ (\lambda \in [0,\ \lambda_E]). \tag{174}$$

補題 4.12 から, λ によらない定数を C として,

$$\int\frac{\rho_{R,\ \lambda}}{|x|}dx \leq C(\int\rho_{R,\ \lambda}dx)^{\frac{1}{6}}(\int\rho^{\frac{5}{3}}_{R,\ \lambda}dx)^{\frac{1}{2}}. \tag{175}$$

(174), (175) から, λ によらない定数を C として,

$$0 \geq E_R(\lambda) \geq -Z\int\frac{\rho_{R,\ \lambda}}{|x|}dx \geq -C(\int\rho_{R,\ \lambda}dx)^{\frac{1}{6}} = -C\lambda^{\frac{1}{6}}\ (\lambda \in [0,\ \lambda_E]).$$

これより $\lambda \downarrow 0$ として,

$$\lim_{\lambda \downarrow 0} E_R(\lambda) = 0 = E_R(0).$$

よって $E_R(\lambda)$ は $\lambda = 0$ で連続.

step2. $0 < \lambda < \infty$ で $E_R(\lambda)$ の右微分が存在し, 右微分は右連続を示す.

まず $E_R(\lambda)$ の $0 < \lambda < \infty$ での右微分の存在を示す. $f(\lambda,\ h) := \frac{E_R(\lambda+h)-E_R(\lambda)}{h}$ $(0 < h)$ とおくと, $E_R(\lambda)$ の凸性から $f(\lambda,\ h)$ は $h \downarrow 0$ で単調減少なので, 右微分 $\lim_{h\downarrow 0} f(\lambda,\ h)$ は $-\infty$ も含めれば極限を持つ. $E_R(\lambda)$ の凸性から $\frac{E_R(\lambda+h)-E_R(\lambda)}{h} \geq \frac{E_R(\lambda)-E_R(\frac{\lambda}{2})}{\frac{\lambda}{2}}$ $(0 < h)$ なので, $\lim_{h\downarrow 0} f(\lambda,\ h)$ は有限値である. $h \downarrow 0$ での $f(\lambda,\ h)$ の単調性から,

$$\lim_{h \downarrow 0} f(\lambda,\ h) = \inf_{0<h} f(\lambda,\ h). \tag{176}$$

次に $E_R(\lambda)$ の $0 < \lambda < \infty$ での右微分は右連続であることを示す.

$f(\lambda + \mu,\ h) := \frac{E_R(\lambda+\mu+h)-E_R(\lambda+\mu)}{h}$ $(0 < \mu,\ 0 < h)$ を考える.

$E_R(\lambda)$ の連続性から,

$$f(\lambda,\ h) = \lim_{\mu \downarrow 0} f(\lambda + \mu,\ h). \tag{177}$$

$E_R(\lambda)$ の凸性から $f(\lambda + \mu,\ h)$ は $\mu \downarrow 0$ で単調減少なので,

$$\lim_{\mu \downarrow 0} f(\lambda + \mu,\ h) = \inf_{0<\mu} f(\lambda + \mu,\ h). \tag{178}$$

式 (176), (177), (178) から,

$$\begin{aligned} \lim_{h\downarrow 0} f(\lambda,\ h) &= \inf_{0<h} \inf_{0<\mu} f(\lambda + \mu,\ h) \\ = &\inf_{0<h\cap 0<\mu} f(\lambda + \mu,\ h) = \inf_{0<\mu} \inf_{0<h} f(\lambda + \mu,\ h) \\ = &\inf_{0<\mu} \lim_{h\downarrow 0} f(\lambda + \mu,\ h) = \lim_{\mu\downarrow 0} \lim_{h\downarrow 0} f(\lambda + \mu,\ h). \end{aligned}$$

これは右微分が右連続であることを意味する.

step3. $0 < \lambda < \infty$ で $E_R(\lambda)$ の左微分が存在し, 左微分は左連続を示す.

$g(\lambda,\ h) := \frac{E_R(\lambda)-E_R(\lambda-h)}{h}$ $(0 < h < \frac{\lambda}{2})$ とし, $g(\lambda - \mu,\ h) := \frac{E_R(\lambda-\mu)-E_R(\lambda-\mu-h)}{h}$ $(0 < \mu < \frac{\lambda}{2})$ も使って, $step2$ と同様にやればよい.

step4. $E_R(\lambda)$ は $\lambda > 0$ で λ について C^1 級であることを示す.

右微分右連続と左微分左連続は示されているので, 右微分と左微分が等しいことを示せばよい. 以下を示せばよい.

$$\begin{aligned} &\frac{E_R(\lambda + \epsilon) - E_R(\lambda)}{\epsilon} - \frac{E_R(\lambda) - E_R(\lambda - \epsilon)}{\epsilon} \\ = &\frac{1}{\epsilon}\{E_R(\lambda + \epsilon) + E_R(\lambda - \epsilon) - 2E_R(\lambda)\} \downarrow 0 \ \ (\epsilon \downarrow 0). \end{aligned}$$

定理 3.2(1) より $E_R(\lambda)$ はミニマイザーを持つ. これを ρ_0 とする. $\frac{\lambda\pm\epsilon}{\lambda}\rho_0 \in \mathscr{T}_{R,\ \lambda\pm\epsilon}$ と $E_R(\lambda)$ の凸性に注意すれば, $\frac{1}{\epsilon}\{\mathscr{E}(\frac{\lambda+\epsilon}{\lambda}\rho_0) + \mathscr{E}(\frac{\lambda-\epsilon}{\lambda}\rho_0) - 2\mathscr{E}(\rho_0)\} \geq$

$\frac{1}{\epsilon}\{E_R(\lambda+\epsilon)+E_R(\lambda-\epsilon)-2E_R(\lambda)\} \geq 0$ なので, $\epsilon \downarrow 0$ で $\frac{1}{\epsilon}\{\mathscr{E}(\frac{\lambda+\epsilon}{\lambda}\rho_0)+\mathscr{E}(\frac{\lambda-\epsilon}{\lambda}\rho_0)-2\mathscr{E}(\rho_0)\} \downarrow 0$ を示せばよい.

$\frac{\epsilon}{\lambda} =: \delta$ とおく. $\epsilon \downarrow 0$ で $\delta \downarrow 0$ である.

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{\epsilon}\{\mathscr{E}(\frac{\lambda+\epsilon}{\lambda}\rho_0) + \mathscr{E}(\frac{\lambda-\epsilon}{\lambda}\rho_0) - 2\mathscr{E}(\rho_0)\} \\
= & \frac{1}{\lambda\delta}\{\mathscr{E}((1+\delta)\rho_0) + \mathscr{E}(1-\delta)\rho_0) - 2\mathscr{E}(\rho_0)\} \\
= & \frac{1}{\lambda\delta}[\{(1+\delta)^{\frac{5}{3}} + (1-\delta)^{\frac{5}{3}} - 2\}\mathscr{E}_K(\rho_0) + \{(1+\delta)+(1-\delta)-2\}\mathscr{E}_A(\rho_0) \\
& \qquad + \{(1+\delta)^2 + (1-\delta)^2 - 2\}D(\rho_0,\ \rho_0) \downarrow 0 \qquad (\delta \downarrow 0).
\end{aligned}$$

step5. $\lambda > 0$ で $\frac{dE_R(\lambda)}{d\lambda} = \epsilon_{RF}(\lambda)$ を示す.

$\lambda,\ \lambda+\epsilon \in (0,\ \infty)$ とし, $E_R(\lambda),\ E_R(\lambda+\epsilon)$ のミニマイザーを $\rho,\ \rho'$ とする. $\frac{\epsilon}{\lambda} =: \delta$ とおく.

$$\begin{aligned}
& E_R(\lambda+\epsilon) - E_R(\lambda) = \mathscr{E}(\rho') - \mathscr{E}(\rho) \leq \mathscr{E}((1+\delta)\rho) - \mathscr{E}(\rho) \\
= & \{(1+\delta)^{\frac{5}{3}} - 1\}\mathscr{E}_K(\rho) + \{(1+\delta)-1\}\mathscr{E}_A(\rho) + \{(1+\delta)^2 - 1\}D(\rho,\ \rho).
\end{aligned}$$

$\epsilon > 0$ の場合.

$$\begin{aligned}
& \frac{E_R(\lambda+\epsilon) - E_R(\lambda)}{\epsilon} \\
\leq & \frac{1}{\lambda\delta}[\{(1+\delta)^{\frac{5}{3}} - 1\}\mathscr{E}_K(\rho) + \{(1+\delta)-1\}\mathscr{E}_A(\rho) + \{(1+\delta)^2 - 1\}D(\rho,\ \rho)].
\end{aligned}$$

$\epsilon \downarrow 0$ で,

$$\frac{dE_R(\lambda)}{d\lambda} = \lim_{\epsilon\downarrow 0}\frac{E_R(\lambda+\epsilon) - E_R(\lambda)}{\epsilon} \leq \frac{1}{\lambda}(\frac{5}{3}\mathscr{E}_K(\rho) + \mathscr{E}_A(\rho) + 2D(\rho,\ \rho)) = \epsilon_{RF}(\lambda).$$

$\epsilon < 0$ の場合.

$$\begin{aligned}
& \frac{E_R(\lambda+\epsilon) - E_R(\lambda)}{\epsilon} \\
\geq & \frac{1}{\lambda\delta}[\{(1+\delta)^{\frac{5}{3}} - 1\}\mathscr{E}_K(\rho) + \{(1+\delta)-1\}\mathscr{E}_A(\rho) + \{(1+\delta)^2 - 1\}D(\rho,\ \rho)].
\end{aligned}$$

$\epsilon = -\tilde{\epsilon}$ とおき, $\epsilon \uparrow 0$ つまり $\tilde{\epsilon} \downarrow 0$ で,

$$\frac{dE_R(\lambda)}{d\lambda} = \lim_{\tilde{\epsilon}\downarrow 0}\frac{E_R(\lambda) - E_R(\lambda-\tilde{\epsilon})}{\tilde{\epsilon}} \geq \frac{1}{\lambda}(\frac{5}{3}\mathscr{E}_K(\rho) + \mathscr{E}_A(\rho) + 2D(\rho,\ \rho)) = \epsilon_{RF}(\lambda).$$

$\epsilon > 0$ の場合と $\epsilon < 0$ の場合をあわせて, $\frac{dE_R(\lambda)}{d\lambda} = \epsilon_{RF}(\lambda)$.

step6. $\lim_{\lambda\downarrow 0}\frac{dE_R(\lambda)}{d\lambda} = -\infty$ を示す. 背理法. $E_R(\lambda)$ が C^1 級で狭義凸関数なので $\frac{dE_R(\lambda)}{d\lambda}$ は狭義増加関数. よって $\lim_{\lambda\downarrow 0}\frac{dE_R(\lambda)}{d\lambda}$ は有限値か $-\infty$ となる. $-\infty$ を否定し $\lim_{\lambda\downarrow 0}\frac{dE_R(\lambda)}{d\lambda} = \lim_{\lambda\downarrow 0}\epsilon_{RF}(\lambda) =: \gamma > -\infty$ とすると,

$$\epsilon_{RF}(\lambda) \geq \gamma > -\infty. \tag{179}$$

補題 12.1 より

$$\rho_{R,\ \lambda}^{\frac{2}{3}}(x) \geq \frac{Z}{|x|} - \int \frac{\rho_{R,\ \lambda}(y)}{|x-y|}dy + \epsilon_{RF}(\lambda)\ (a.\ e.\ x \in\ B(R)). \tag{180}$$

補題 4.12 と (174) から, λ によらない定数 C があって,

$$\int \frac{\rho_{R,\ \lambda}(y)}{|x-y|}dy \leq C'(\int \rho_{R,\ \lambda}dx)^{\frac{1}{6}}(\int \rho_{R,\ \lambda}^{\frac{5}{3}}dx)^{\frac{1}{2}} \leq C. \tag{181}$$

(179), (180), (181) から,

$$\rho_{R,\ \lambda}^{\frac{2}{3}}(x) \geq \frac{Z}{|x|} - C + \gamma.$$

これより, 開球 $B(r)$ を十分小さくとれば, 正定数 $\delta > 0$ があって, 開球 $B(r)$ 内では $\rho_{R,\ \lambda}(x)^{\frac{2}{3}} \geq \delta > 0$ とできる. これより λ によらず,

$$\int \rho_{R,\ \lambda}(x)dx \geq \int_{B(r)} \rho_{R,\ \lambda}(x) \geq \int_{B(r)} \delta^{\frac{3}{2}} = \delta^{\frac{3}{2}}|B(r)| > 0.$$

これは $\lim_{\lambda\downarrow 0}\int \rho_{R,\ \lambda}(x)dx = 0$ と矛盾する.

13 命題 13.1(ρ_R, λ_R, E_R の連続性および単調性) の証明.

13.1 命題 13.1

定理 13.1 R を動かしたときの E_R, λ_R, ρ_R について, 次の性質が成り立つ.

(1) $E_R < 0$, $\lim_{R\downarrow 0} E_R = 0$ で, E_R は $R \in (0,\ \infty)$ で連続関数.

(2) $R_0 \in (0,\ \infty)$ として, $R \to R_0$ で, 各点収束 $\rho_R(x) \to \rho_{R_0}(x)$ $(x \in \{x|0 < |x| < R_0$または $R_0 < |x|\})$ が成り立つ.

(3) $Z \geq \lambda_R > 0$, λ_R は $R \in (0,\ \infty)$ で, R について連続な関数.

(4) $1 \leq r \leq \frac{5}{3}$ とする. このとき $R_0 \in (0,\ \infty)$ として, $R \to R_0$ で, 強収束 $\rho_R \to \rho_{R_0}$ in $L^r(\mathbb{R}^3)$ が成り立つ.

(5) $R \in (0,\ \infty)$ で, E_R は狭義減少関数であって C^1 級で, 次が成り立つ.

$$\frac{dE_R}{dR} = \frac{1}{R}(3\mathscr{E}_K(\rho_R) + 2\mathscr{E}_A(\rho_R) + 5D(\rho_R,\ \rho_R)) \leq 0.$$

(6)([6, Theorem II. 29] 参考) $R \in (0,\ \infty)$ で λ_R は狭義増加関数.

13.2 命題 13.1(1)(E_R の連続性) の証明.

補題 13.2 大きい R_M をとり,

$$\rho_R(x) \le \chi_{B(R_M)} \frac{Z^{\frac{3}{2}}}{|x|^{\frac{3}{2}}} \quad (\forall x \in \mathbb{R}^3 \setminus \{0\},\ \forall R \in (0,\ R_M)).$$

これより, 任意の $\epsilon > 0$ を固定し, $R,\ p$ によらない定数 C があって,

$$||\rho_R||_p \le C \quad (\forall R \in (0,\ R_M),\ \forall p \le 2 - \epsilon).$$

(証明) 定理 3.1(2) より

$$\rho_R(x)^{\frac{2}{3}} = \frac{Z}{|x|} - \int \frac{\rho_R(y)}{|x-y|} dy \le \frac{Z}{|x|} \quad (B(R) \setminus \{0\}).$$

これと $|x| \ge R$ で $\rho_R(x) = 0$ から,

$$\rho_R(x) \le \chi_{B(R_M)} \frac{Z^{\frac{3}{2}}}{|x|^{\frac{3}{2}}} \quad (\forall x \in \mathbb{R}^3 \setminus \{0\},\ \forall R \in (0,\ R_M)).$$

これより R によらず p に依存する定数 C_p があって,

$$||\rho_R||_p \le C_p \quad (\forall R \in [0,\ R_M),\ \forall p < 2).$$

これから補間公式により, 任意の $\epsilon > 0$ を固定し, $R,\ p$ によらない定数 C があって,

$$||\rho_R||_r \le C \quad (\forall R \in [0,\ R_M),\ \forall p \le 2 - \epsilon).$$

命題 13.1(1) の証明. step1. $E_R < 0$ かつ $\lim_{R\downarrow 0} E_R = 0$ を示す.

任意の $R \in (0,\ \infty)$ に対して $0 > \mathscr{E}(\rho)$ となる $\rho \in \mathscr{T}$ があるので $E_R < 0$. (たとえば $\int \frac{Z\rho_0(x)}{|x|} dx > 0$ となる $\rho_0(x)$ に対して $\mathscr{E}(\lambda\rho_0(x))$ を考えれば, $\lambda > 0$ を十分小さくとれば $\mathscr{E}(\lambda\rho_0(x)) < 0$ となる.) また定理 3.1(1) の証明の $step1$ 式 (147) より $E_R \ge -CZ^{\frac{5}{2}} R^{\frac{1}{2}}$.

両者あわせて $0 > E_R \ge -CZ^{\frac{5}{2}} R^{\frac{1}{2}}$ より $\lim_{R\downarrow 0} E_R = 0$.

step2. $R \in (0,\ \infty)$ での E_R の R についての連続性を示す. $h > 0$, E_R のミニマイザーを ρ_R とすると, $\mathscr{T}_R \subset \mathscr{T}_{R+h}$ より $E_R = \inf\{\mathscr{E}(\rho) | \rho \in \mathscr{T}_R\} \ge \inf\{\mathscr{E}(\rho) | \rho \in \mathscr{T}_{R+h}\} = E_{R+h}$. つまり E_R は広義減少関数. これより,

$$\begin{aligned} 0 \le E_R - E_{R+h} &= \mathscr{E}(\rho_R) - \mathscr{E}(\rho_{R+h}) \le \mathscr{E}(\chi_{B(R)}\rho_{R+h}) - \mathscr{E}(\rho_{R+h}) \\ &= \mathscr{E}_K(\chi_{B(R)}\rho_{R+h}) - \mathscr{E}_K(\rho_{R+h}) + \mathscr{E}_A(\chi_{B(R)}\rho_{R+h}) - \mathscr{E}_A(\rho_{R+h}) \\ &\qquad + D(\chi_{B(R)}\rho_{R+h},\ \chi_{B(R)}\rho_{R+h}) - D(\rho_{R+h},\ \rho_{R+h}). \end{aligned}$$

積分領域の包含関係から $\mathscr{E}_K(\chi_{B(R)}\rho_{R+h}) - \mathscr{E}_K(\rho_{R+h}) \le 0$,
$D(\chi_{B(R)}\rho_{R+h},\ \chi_{B(R)}\rho_{R+h}) - D(\rho_{R+h},\ \rho_{R+h}) \le 0$ なので,

$$\begin{aligned} 0 \le E_R - E_{R+h} &\le \mathscr{E}_A(\chi_{B(R)}\rho_{R+h}) - \mathscr{E}_A(\rho_{R+h}) = Z \int_{B(R+h)\setminus B(R)} \frac{\rho_{R+h}}{|x|} dx \\ &\le \frac{Z}{R} \int_{B(R+h)\setminus B(R)} \rho_{R+h} dx \le \frac{Z}{R} ||\rho_{R+h}||_{\frac{5}{3}} |B(R+h) \setminus B(R)|^{\frac{2}{5}}. \end{aligned}$$

命題 7.1 から $R+h$ によらず $||\rho_{R+h}||_{\frac{5}{3}} \leq C$ と定数で押さえられ,

$$0 \leq E_R - E_{R+h} \leq \frac{Z}{R} C |B(R+h) \backslash B(R)|^{\frac{2}{5}} \to 0 \ (h \downarrow 0).$$

これで右連続が示された. 続けて同様に左連続を示す.

$$\begin{aligned}
&0 \leq E_{R-h} - E_R = \mathscr{E}(\rho_{R-h}) - \mathscr{E}(\rho_R) \leq \mathscr{E}(\chi_{B(R-h)}\rho_R) - \mathscr{E}(\rho_R) \\
&\leq \mathscr{E}_A(\chi_{B(R-h)}\rho_R) - \mathscr{E}_A(\rho_R) = Z \int_{B(R)\backslash B(R-h)} \frac{\rho_R}{|x|} dx \\
&\leq \frac{Z}{R-h} \int_{B(R)\backslash B(R-h)} \rho_R dx \leq \frac{Z}{R-h} C |B(R)\backslash B(R-h)|^{\frac{2}{5}} \to 0 \ (h \downarrow 0).
\end{aligned}$$

13.3 命題 13.1(2)($\rho_R(x)$ の R に関する連続性) の証明.

補題 13.3 E_R のミニマイザーを ρ_R とし, $R \to R_0 (R, R_0 \in (0, \infty))$ ならば, $\rho_R \rightharpoonup \rho_{R_0}$ in $L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3)$ と弱収束する.

(証明) step1. まず $\{\chi_{B(R_0)}\rho_{R_m}\} \subset \mathscr{T}_{R_0}$, 命題 7.1 より, $\{\chi_{B(R_0)}\rho_{R_m}\}$ は $L^{\frac{5}{3}}$ で有界列である. よって, $m \to \infty$ で $R_m \to R_0$ のとき, $\{R_m\}$ のある部分列 $\{R_n\}$ と $\tilde{\rho} \in L^{\frac{5}{3}}$ が存在し, $\chi_{B(R_0)}\rho_{R_n} \rightharpoonup \tilde{\rho}$ in $L^{\frac{5}{3}}$. 以上で補題 4.18 の仮定を満たすので,

$$\tilde{\rho} \in \mathscr{T}_{R_0}, \ \liminf_{n\to\infty} \mathscr{E}(\chi_{B(R_0)}\rho_{R_n}) \geq \mathscr{E}(\tilde{\rho}). \tag{182}$$

一方, E_R の連続性から,

$$\begin{aligned}
E_{R_0} &= \liminf_{n\to\infty} \mathscr{E}(\rho_{R_n}) \\
&\geq \liminf_{n\to\infty} \mathscr{E}(\chi_{B(R_0)}\rho_{R_n}) + \liminf_{n\to\infty} \{\mathscr{E}(\rho_{R_n}) - \mathscr{E}(\chi_{B(R_0)}\rho_{R_n})\}.
\end{aligned} \tag{183}$$

また命題 13.1(1) の E_R の連続性の証明と同様のやり方で

$$\begin{aligned}
0 &\leq \mathscr{E}(\chi_{B(R_0)}\rho_{R_n}) - \mathscr{E}(\rho_{R_n}) \leq \mathscr{E}_A(\chi_{B(R_0)}\rho_{R_n}) - \mathscr{E}_A(\rho_{R_n}) \\
&= Z \int_{B(R_n)\backslash B(R_0)} \frac{\rho_R}{|x|} dx \leq \frac{Z}{R_n} \int_{B(R_n)\backslash B(R_0)} \rho_{R_n} dx \\
&\leq \frac{Z}{R_n} C |B(R_n)\backslash B(R_0)|^{\frac{2}{5}} \to 0 \ (n \to \infty).
\end{aligned} \tag{184}$$

上の式で $R_n \leq R_0$ の場合は $\mathscr{E}(\chi_{B(R_0)}\rho_{R_n}) - \mathscr{E}(\rho_{R_n}) = \frac{Z}{R_n} C |B(R_n)\backslash B(R_0)|^{\frac{2}{5}} = 0$ である. (182), (183), (184) から,

$$E_{R_0} \geq \mathscr{E}(\tilde{\rho}).$$

step2. 逆に (182) の $\tilde{\rho} \in \mathscr{T}_R$ から $E_R \leq \mathscr{E}(\tilde{\rho})$. 従って,

$$E_{R_0} = \mathscr{E}(\tilde{\rho}).$$

E_{R_0} のミニマイザーの一意性から $\tilde{\rho} = \rho_{R_0}$. 部分列の取り方によらず $\tilde{\rho} = \rho_{R_0}$ なので, 部分列をとらなくても, $R \to R_0$ なら $\rho_R \rightharpoonup \rho_{R_0}$ と弱収束する.

命題 13.1(2) の証明.

$R_0 < |x|$ なる x では R_0 に十分近い R では $R < |x|$ なので,

$$\lim_{R\to R_0} \rho_R(x) = 0 = \rho_{R_0}(x).\ (R_0 < |x|).$$

$R_0 > |x|$ なる x では R_0 に十分近い R では $R > |x|$ なので, 定理 3.1(2) より,

$$\begin{aligned}\rho_R(x)^{\frac{2}{3}} &= \frac{Z}{|x|} - \int \frac{\rho_R(y)}{|x-y|}dy = \frac{Z}{|x|} - \int \frac{\rho_{R_0}(y)}{|x-y|}dy - \int \frac{(\rho_R(y)-\rho_{R_0}(y))}{|x-y|}dy \\ &= \rho_{R_0}(x)^{\frac{2}{3}} - \int (\rho_R(y)-\rho_{R_0}(y))\frac{\chi_{B(R_M)}(y)}{|x-y|}dy.\end{aligned} \tag{185}$$

ここで R_M は $R,\ R_0$ より大きい定数とする. $\frac{\chi_{B(R_M)}(y)}{|x-y|} \in L_y^{\frac{5}{2}}(\mathbb{R}^3)$ と弱収束 $\rho_R \rightharpoonup \rho_{R_0}$ in $L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3)$ より,

$$\lim_{R\to R_0} \int (\rho_R(y)-\rho_{R_0}(y))\frac{\chi_{B(R_M)}(y)}{|x-y|}dy = 0. \tag{186}$$

(185), (186) から,

$$\lim_{R\to R_0} \rho_R(x)^{\frac{2}{3}} = \rho_{R_0}(x)^{\frac{2}{3}}.$$

よって,

$$\lim_{R\to R_0} \rho_R(x) = \rho_{R_0}(x)\ (0 < |x| < R_0).$$

13.4 命題 13.1(3)(λ_R の連続性) の証明.

(証明) 定理 3.1(2) より $Z \geq \lambda_R$. $\lambda_R = 0$ とすると $E_R = 0$ となり, 命題 13.1(1) の $E_R < 0$ に矛盾するので $\lambda_R > 0$.

命題 13.1(2) より $\lim_{R\to R_0} \rho_R(x) = \rho_{R_0}(x)$ $(a.\ e.\ x)$. 命題 7.1 より $\rho_R(x) \leq \chi_{B(R_M)}\frac{Z^{\frac{3}{2}}}{|x|^{\frac{3}{2}}} \in L^1(\mathbb{R}^3)$. これらよりルベーグ収束定理が使えて,

$$\lim_{R\to R_0} \lambda_R = \lim_{R\to R_0} \int \rho_R dx = \int \lim_{R\to R_0} \rho_R dx = \int \rho_{R_0} dx = \lambda_{R_0}. \tag{187}$$

13.5 命題 13.1(4)($\rho_R(x)$ の R に関する $L^1(\mathbb{R}^3)$, $L^{\frac{5}{3}}(\mathbb{R}^3)$ 連続) の証明.

(証明) 命題 13.1(2) より $\lim_{R\to R_0} \rho_R(x)^{\frac{5}{3}} = \rho_{R_0}(x)^{\frac{5}{3}}$. 命題 7.1 より $\rho_R(x)^{\frac{5}{3}} \leq \chi_{B(R_M)}\frac{Z^{\frac{5}{2}}}{|x|^{\frac{5}{2}}}, \in L^1(\mathbb{R}^3)$. これらよりルベーグ収束定理が使えて,

$$\lim_{R\to R_0} \int \rho_R^{\frac{5}{3}} dx = \int \lim_{R\to R_0} \rho_R^{\frac{5}{3}} dx = \int \rho_{R_0}^{\frac{5}{3}} dx. \tag{188}$$

式 (188) と命題 13.1(3) の式 (187) から $L^{\frac{5}{3}}$ と L^1 で ρ_R は ρ_{R_0} へノルム収束. このことと命題 13.1(2) の各点収束から, 補題 4.19 より, $L^{\frac{5}{3}}$ と L^1 で ρ_R は ρ_{R_0} へ強収束する. 補間公式より,

$$\rho_R \to \rho_{R_0} \ \text{ in } \ L^r(\mathbb{R}^3)\ (R \to R_0 \in (0,\ \infty),\ 1 \le r \le \frac{5}{3}).$$

13.6　命題 13.1(5)(E_R の狭義減少性) の証明.

(証明) step1. E_R が狭義減少を示す.

E_R のミニマイザーを ρ_R とし, $R_1 < R_2$ とすると, $\mathscr{T}_{R_1} \subset \mathscr{T}_{R_2}$ より E_{R_1} $= \inf\{\mathscr{E}(\rho)|\rho \in \mathscr{T}_{R_1}\} \ge \inf\{\mathscr{E}(\rho)|\rho \in \mathscr{T}_{R_2}\} = E_{R_2}$. よって E_R は広義減少関数.

次に背理法で狭義減少を示す. もしそうでないと $R_1 < R_2$ かつ $E_{R_1} = E_{R_2}$ となる $R_1,\ R_2$ がある. このとき定理 3.1(1) より $E_{R_1},\ E_{R_2}$ にはそれぞれただ 1 つのミニマイザー $\rho_{R_1},\ \rho_{R_2}$ がある. 定理 3.1(4) より $\rho_{R_1} \ne \rho_{R_2}$. ところが $E_{R_1} = E_{R_2}$ より ρ_{R_1} は E_{R_2} のミニマイザーにもなり, ミニマイザーの一意性に矛盾.

step2. $\frac{dE_R}{dR} = \frac{1}{R}(3\mathscr{E}_K(\rho_R) + 2\mathscr{E}_A(\rho_R) + 5D(\rho_R,\ \rho_R))$ を示す.

$h > 0$ とし,

$$\rho_R(\frac{R}{R \pm h}x) \in \mathscr{T}_{R\pm h}, \qquad \rho_{R\pm h}(\frac{R \pm h}{R}x) \in \mathscr{T}_R.$$

これより,

$$\begin{aligned}
\frac{I_+}{h} := \frac{\mathscr{E}(\rho_{R+h}(x)) - \mathscr{E}(\rho_{R+h}(\frac{R+h}{R}x))}{h} \quad &\le \quad \frac{E_{R+h} - E_R}{h} \\
&\le \quad \frac{\mathscr{E}(\rho_R(\frac{R}{R+h}x)) - \mathscr{E}(\rho_R(x))}{h} =: \frac{J_+}{h},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{J_-}{-h} := \frac{\mathscr{E}(\rho_R(\frac{R}{R-h}x)) - \mathscr{E}(\rho_R(x))}{-h} \quad &\le \quad \frac{E_{R-h} - E_R}{-h} \\
&\le \quad \frac{\mathscr{E}(\rho_{R-h}(x)) - \mathscr{E}(\rho_{R-h}(\frac{R-h}{R}x))}{-h} =: \frac{I_-}{-h}.
\end{aligned}$$

従って次を示せばよい.

$$\lim_{h\downarrow 0} \frac{I_\pm}{\pm h} = \lim_{h\downarrow 0} \frac{J_\pm}{\pm h} = \frac{1}{R}(3\mathscr{E}_K(\rho_R) + 2\mathscr{E}_A(\rho_R) + 5D(\rho_R,\ \rho_R)).$$

$\mathscr{E}(\rho_{R\pm h}(\frac{R\pm h}{R}x))$ で $\frac{R\pm h}{R}x = z$ と変数変換し, $\mathscr{E}(\rho_{R\pm h}(x))$ と積分範囲をそろえ,

$$
\begin{aligned}
&I_\pm := \mathscr{E}(\rho_{R\pm h}(x)) - \mathscr{E}(\rho_{R\pm h}(\frac{R\pm h}{R}x)) \\
&= \frac{3}{5}\int_{B(R\pm h)} \rho_{R\pm h}(x)^{\frac{5}{3}}dx - \int_{B(R\pm h)} \frac{Z\rho_{R\pm h}(x)}{|x|}dx \\
&\quad +\frac{1}{2}\int_{B(R\pm h)^2} \frac{\rho_{R\pm h}(x)\rho_{R\pm h}(y)}{|x-y|}dxdy - \{\frac{3}{5}\int_{B(R)} \rho_{R\pm h}(\frac{R\pm h}{R}x)^{\frac{5}{3}}dx \\
&\qquad -\int_{B(R)} \frac{Z\rho_{R\pm h}(\frac{R\pm h}{R}x)}{|x|}dx + \frac{1}{2}\int_{B(R)^2} \frac{\rho_{R\pm h}(\frac{R\pm h}{R}x)\rho_{R\pm h}(\frac{R\pm h}{R}y)}{|x-y|}dxdy\} \\
&= \{1-(\frac{R}{R\pm h})^3\}\frac{3}{5}\int_{B(R\pm h)} \rho_{R\pm h}(x)^{\frac{5}{3}}dx \\
&\quad -\{1-(\frac{R}{R\pm h})^2\}\int_{B(R\pm h)} \frac{Z\rho_{R\pm h}(x)}{|x|}dx \\
&\qquad +\{1-(\frac{R}{R\pm h})^5\}\frac{1}{2}\int_{B(R\pm h)^2} \frac{\rho_{R\pm h}(x)\rho_{R\pm h}(y)}{|x-y|}dxdy.
\end{aligned}
$$

これより, 積分の極限にはルベーグ収束定理を使い,

$$
\begin{aligned}
\frac{I_\pm}{\pm h} &= \frac{\{1-(\frac{R}{R\pm h})^3\}}{\pm h}\mathscr{E}_K(\rho_{R\pm h}) + \frac{\{1-(\frac{R}{R\pm h})^2\}}{\pm h}\mathscr{E}_A(\rho_{R\pm h}) \\
&\qquad + \frac{\{1-(\frac{R}{R\pm h})^5\}}{\pm h}D(\rho_{R\pm h},\ \rho_{R\pm h}) \\
&\to \frac{3}{R}\mathscr{E}_K(\rho_R) + \frac{2}{R}\mathscr{E}_A(\rho_R) + \frac{5}{R}D(\rho_R,\ \rho_R)\ (h\downarrow 0).
\end{aligned}
$$

同様に,

$$
\begin{aligned}
&J_\pm := \mathscr{E}(\rho_R(\frac{R}{R\pm h}x)) - \mathscr{E}(\rho_R(x)) \\
&= \frac{3}{5}\int_{B(R\pm h)} \rho_{R\pm h}(\frac{R}{R\pm h}x)^{\frac{5}{3}}dx - \int_{B(R\pm h)} \frac{Z\rho_{R\pm h}(\frac{R}{R\pm h}x)}{|x|}dx \\
&\quad +\frac{1}{2}\int_{B(R\pm h)^2} \frac{\rho_{R\pm h}(\frac{R}{R\pm h}x)\rho_{R\pm h}(\frac{R}{R\pm h}y)}{|x-y|}dxdy - \{\frac{3}{5}\int_{B(R)} \rho_{R\pm h}(x)^{\frac{5}{3}}dx \\
&\qquad -\int_{B(R)} \frac{Z\rho_{R\pm h}(x)}{|x|}dx + \frac{1}{2}\int_{B(R)^2} \frac{\rho_{R\pm h}(x)\rho_{R\pm h}(y)}{|x-y|}dxdy\} \\
&= \{(\frac{R\pm h}{R})^3 - 1\}\frac{3}{5}\int_{B(R)} \rho_{R\pm h}(x)^{\frac{5}{3}}dx - \{(\frac{R\pm h}{R})^2 - 1\}\int_{B(R)} \frac{Z\rho_{R\pm h}(x)}{|x|}dx \\
&\qquad +\{(\frac{R\pm h}{R})^5 - 1\}\frac{1}{2}\int_{B(R)^2} \frac{\rho_{R\pm h}(x)\rho_{R\pm h}(y)}{|x-y|}dxdy.
\end{aligned}
$$

これより,

$$
\frac{J_\pm}{\pm h} \to \frac{3}{R}\mathscr{E}_K(\rho_R) + \frac{2}{R}\mathscr{E}_A(\rho_R) + \frac{5}{R}D(\rho_R,\ \rho_R)\ (h\downarrow 0).
$$

step3. E_R が狭義単調減少なので
$\frac{dE_R}{dR} = \frac{1}{R}(3\mathscr{E}_K(\rho_R) + 2\mathscr{E}_A(\rho_R) + 5D(\rho_R,\ \rho_R)) \le 0.$

また $\mathscr{E}_K(\rho_R)$, $\mathscr{E}_A(\rho_R)$, $D(\rho_R,\ \rho_R)$ それぞれの R についての連続性はルベーグ収束定理を使って示せるので E_R は C^1 級である.

13.7 命題 13.1(6)(λ_R の狭義減少性) の証明.

補題 13.4 $E_R(\lambda)$ のミニマイザーを $\rho_{R,\ \lambda}$ とし,

$$\epsilon_{RF}(\lambda) = S_R(\rho_{R,\ \lambda}) = \inf\{S_R(\rho)|\rho \in \mathscr{T}_{R,\ \partial\lambda}\text{かつ}\rho\text{は球対称}\}.$$

但し

$$\begin{aligned}&V_\rho(x) := \frac{Z}{|x|} - \int \frac{\rho(y)}{|x-y|}dy, \quad B_+(R) := \{x \in B(R)|\rho(x) > 0\},\\ &S_R(\rho) := \text{ess. } \sup\{\rho^{\frac{2}{3}}(x) - V_\rho(x) \mid x \in B_+(R)\}.\end{aligned}$$

(証明) step1. $\epsilon_{RF}(\lambda) = S_R(\rho_{R,\ \lambda}) \geq \inf\{S_R(\rho)|\rho \in \mathscr{T}_{R,\ \partial\lambda}\text{かつ}\rho\text{は球対称}\}$ を示す.

定理 3.2(1) より $\rho_{R,\ \lambda}$ は球対称で, また $\rho_{R,\ \lambda} \in \mathscr{T}_{R,\ \partial\lambda}$ なので,

$$S_R(\rho_{R,\ \lambda}) \geq \inf\{S_R(\rho)|\rho \in \mathscr{T}_{R,\ \partial\lambda}\text{かつ}\rho\text{は球対称}\}.$$

補題 12.1 のオイラーラグランジュ方程式より $\rho_{R,\ \lambda}(x) > 0$ の点 x では $\rho_{R,\ \lambda}^{\frac{2}{3}}(x) = V_{\rho_{R,\ \lambda}}(x) + \epsilon_{RF}(\lambda)$ なので,

$$\begin{aligned}S_R(\rho_{R,\ \lambda}) &= \text{ess. } \sup\{\rho_{R,\ \lambda}^{\frac{2}{3}}(x) - V_{\rho_{R,\ \lambda}}(x) \mid x \in B_+(R)\}\\ &= \text{ess. } \sup\{\epsilon_{RF}(\lambda) \mid x \in B_+(R)\} = \epsilon_{RF}(\lambda).\end{aligned}$$

step2. $S_R(\rho_{R,\ \lambda}) = \inf\{S_R(\rho)|\rho \in \mathscr{T}_{R,\ \partial\lambda}\text{かつ}\rho\text{は球対称}\}$ を背理法で示す. 最終的に $step4$ で矛盾に到達する.

結論を否定し $S_R(\rho_{R,\ \lambda}) > \inf\{S_R(\rho)|\rho \in \mathscr{T}_{R,\ \partial\lambda}\text{かつ}\rho\text{は球対称}\}$ と仮定すると, 球対称な $\rho_1 \in \mathscr{T}_{R,\ \partial\lambda}$ が存在して, $\epsilon_{RF}(\lambda) > S_R(\rho_1)$ となる. また定理 3.2(2)(3) より $E_R(\lambda)$ は λ について狭義凸関数で C^1 級なので, $\epsilon_{RF}(\lambda) = \frac{dE_R(\lambda)}{d\lambda}$ が連続狭義増加関数である. この両者から,

$$\exists\lambda' < \lambda\ s.\,t.\ \epsilon_{RF}(\lambda) > \epsilon_{RF}(\lambda') > S_R(\rho_1). \tag{189}$$

$E_R(\lambda')$ のミニマイザーを $\rho_{R,\ \lambda'}$ とすれば $step1$ より, $S_R(\rho_{R,\ \lambda'}) = \epsilon_{RF}(\lambda')$. これと (189) から,

$$\epsilon_{RF}(\lambda') = S_R(\rho_{R,\ \lambda'}) > S_R(\rho_1), \tag{190}$$

$$\int \rho_{R,\ \lambda'}dx = \lambda' < \lambda = \int \rho_1 dx. \tag{191}$$

step3. $V_{\rho_1}(x) \leq V_{\rho_{R,\ \lambda}}(x)$ となる $a.\ e.\ x$ で $\rho_1(x) \leq \rho_{\rho_{R,\ \lambda}}(x)$ となることを示す.

$\rho_1(x) = 0$ の点 x では成立するので, $\rho_1(x) > 0$ なる $a.e.\ x$ で, $\rho_1^{\frac{2}{3}}(x) - V_{\rho_1}(x) \le$ ess. $\sup\{\rho_1^{\frac{2}{3}}(x) - V_{\rho_1}(x) \mid x \in B_+(R)\} = S_R(\rho_1)$ より,

$$\rho_1^{\frac{2}{3}}(x) \le S_R(\rho_1) + V_{\rho_1}(x).$$

(190) と $V_{\rho_1}(x) \le V_{\rho_{R,\ \lambda}}(x)$ から, 次にオイラーラグランジュ方程式から $\rho_{R,\ \lambda}^{\frac{2}{3}}(x) - V_{\rho_{R,\ \lambda}}(x)$ なので,

$$\rho_1^{\frac{2}{3}}(x) \le \epsilon_{RF}(x) + V_{\rho_{R,\ \lambda}}(x) \le \rho_{R,\ \lambda}^{\frac{2}{3}}(x).$$

よって,

$$V_{\rho_1}(x) \le V_{\rho_{R,\ \lambda}}(x) \text{ となる } a.e.\ x \text{ で } \rho_1(x) \le \rho_{\rho_{R,\ \lambda}}(x).$$

step4. 矛盾を導く. $r_0 := \sup\{|x| \mid V_{\rho_1}(x) - V_{\rho_{R,\ \lambda'}}(x) > 0\}$ とおく. 補題 4.17 より $V_{\rho_1}(x) - V_{\rho_{R,\ \lambda'}}(x)$ は連続関数なので $|x| = r_0$ で $V_{\rho_1}(x) - V_{\rho_{R,\ \lambda'}}(x) = 0$ に注意して, 場合分けして考える.

$r_0 = R$ の場合. $|x| = R$ で,

$$\begin{aligned} 0 &= V_{\rho_1}(x) - V_{\rho_{R,\ \lambda'}}(x) = \int \frac{\rho_{\rho_{R,\ \lambda'}}(y) - \rho_1(y)}{|x-y|}dy = \int \frac{\rho_{\rho_{R,\ \lambda'}}(y) - \rho_1(y)}{\max\{R,\ |y|\}}dy \\ &= \frac{1}{R}\int (\rho_{R,\ \lambda'} - \rho_1)dy = \frac{1}{R}(\lambda' - \lambda). \end{aligned}$$

これは (191) に矛盾.

$r_0 < R$ の場合. $|x| = r_0 < R$ で,

$$\begin{aligned} 0 &= V_{\rho_1}(x) - V_{\rho_{R,\ \lambda'}}(x) = \int \frac{\rho_{\rho_{R,\ \lambda'}}(y) - \rho_1(y)}{\max\{r_0,\ |y|\}}dy \\ &= \int_{B(r_0)} \frac{\rho_{\rho_{R,\ \lambda'}}(y) - \rho_1(y)}{r_0}dy + \int_{B(R)\setminus B(r_0)} \frac{\rho_{\rho_{R,\ \lambda'}}(y) - \rho_1(y)}{y}dy. \end{aligned}$$

$B(R)\setminus B(r_0)$ では $V_{\rho_1}(x) - V_{\rho_{R,\ \lambda'}}(x) \le 0$ なので $step3$ から $\rho_{\rho_{R,\ \lambda'}}(y) - \rho_1(y) \ge 0$ $(a.e.\ x)$. よって,

$$0 \le \int_{B(r_0)} \frac{\rho_{\rho_{R,\ \lambda'}}(y) - \rho_1(y)}{r_0}dy + \int_{B(R)\setminus B(r_0)} \frac{\rho_{\rho_{R,\ \lambda'}}(y) - \rho_1(y)}{r_0}dy = \frac{1}{r_0}(\lambda' - \lambda).$$

これは (191) に矛盾.

補題 13.5

$$\forall\lambda \in (0,\ \infty) \text{ で } R < R' \text{ ならば } \epsilon_{RF}(\lambda) \ge \epsilon_{R'F}(\lambda).$$
$$\text{特に} \lambda = \lambda_R \text{ で } R < R' \text{ ならば } 0 = \epsilon_{RF}(\lambda_R) > \epsilon_{R'F}(\lambda_R).$$

(証明) step1. $R < R'$ ならば $\rho_{R,\ \lambda} \in \mathscr{T}_{R',\ \partial\lambda}$ かつ $\rho_{R,\ \lambda}$ は球対称なので, また補題 13.4 より

$$\begin{aligned}\epsilon_{RF}(\lambda) &= S_R(\rho_{R,\ \lambda}) = S_{R'}(\rho_{R,\ \lambda}) \\ &\geq \inf\{S_{R'}(\rho) \mid \rho \in \mathscr{T}_{R',\ \partial\lambda} \text{かつ} \rho \text{ は球対称 }\} = \epsilon_{R'F}(\lambda).\end{aligned}$$

step2. $E_R(\lambda_R) = E_R$ のミニマイザーを ρ_R とし, $t := \frac{R'}{R} > 1$ に対し $\rho_t(x) := \frac{1}{t^3}\rho_R(\frac{x}{t})$ とおくと, ρ_t は球対称かつ $\rho_t \in \mathscr{T}_{R',\ \partial\lambda_R}$ なので,

$$S_{R'}(\rho_t) \geq \inf\{S_{R'}(\rho) \mid \rho \in \mathscr{T}_{R',\ \partial\lambda_R} \text{かつ} \rho \text{ は球対称 }\} = \epsilon_{R'F}(\lambda_R). \tag{192}$$

一方

$$\begin{aligned}S_{R'}(\rho_t) &= \text{ess. } \sup\{\rho_t^{\frac{2}{3}}(x) - V_{\rho_t}(x) \mid x \in B_+(R')\} \\ &= \text{ess. } \sup\{(\frac{1}{t^3}\rho_R(\frac{x}{t}))^{\frac{2}{3}} - (\frac{Z}{|x|} - \int_{B(R')} \frac{\rho_R(\frac{y}{t})dy}{t^3|x-y|}) \mid x \in B_+(R')\}.\end{aligned}$$

ここで $tu := x,\ tw := y$ と変数変換すると $x \in B_+(R')$ から $u \in B_+(R)$ となり,

$$S_{R'}(\rho_t) = \text{ess. } \sup\{\frac{1}{t^2}\rho_R(u)^{\frac{2}{3}} - \frac{1}{t}(\frac{Z}{|u|} - \int_{B(R)} \frac{\rho_R(w)dw}{|u-w|}) \mid u \in B_+(R)\}.$$

ところで, ρ_R は E_R のミニマイザーなのでオイラーラグランジュ方程式 $\rho_R(u)^{\frac{2}{3}} = (\frac{Z}{|u|} - \int_{B(R)} \frac{\rho_R(w)dw}{|u-w|})$ が成り立ち,

$$S_{R'}(\rho_t) = (\frac{1}{t^2} - \frac{1}{t})\text{ess. } \sup\{\rho_R(u)^{\frac{2}{3}} \mid u \in B_+(R)\} < 0. \tag{193}$$

(192), (193) より,

$$0 = \epsilon_{RF}(\lambda_R) > S_{R'}(\rho_t) \geq \epsilon_{R'F}(\lambda_R).$$

命題 13.1(6) の証明.

$R < R'$ とする. 定理 3.2(2)(3) より,

$$\epsilon_{R'F}(\lambda_{R'}) = \frac{dE_{R'}(\lambda)}{d\lambda}|_{\lambda=\lambda_{R'}} = 0.$$

補題 13.5 より

$$0 = \epsilon_{RF}(\lambda_R) > \epsilon_{R'F}(\lambda_R).$$

この 2 式から,

$$0 = \epsilon_{R'F}(\lambda_{R'}) > \epsilon_{R'F}(\lambda_R) = \frac{dE_{R'}(\lambda)}{d\lambda}|_{\lambda=\lambda_R}.$$

$0 > \frac{dE_{R'}(\lambda)}{d\lambda}|_{\lambda=\lambda_R}$ と定理 3.2(2)(3) より, $\lambda_R \in (0,\ \lambda_{R'})$. つまり $\lambda_R < \lambda_{R'}$.

14　定理 3.3($R \to \infty$ における連続性) の証明.

14.1　定理 3.3(1) の証明.

(証明) step1. $\lim_{R\to\infty} E_R = E_{TF}$ を示す. $\chi_{B(R)}\rho_{TF} \in \mathscr{T}_R$ より,

$$\mathscr{E}(\chi_{B(R)}\rho_{TF}) \geq E_R.$$

$\rho_R \in \mathscr{T}$ より,

$$E_R = \mathscr{E}(\rho_R) \geq E_{TF}.$$

単調収束定理より,

$$\begin{aligned}
&\lim_{R\to\infty} \mathscr{E}(\chi_{B(R)}\rho_{TF}) \\
&= \lim_{R\to\infty} \frac{3}{5}\int \chi_{B(R)}\rho_{TF}(x)^{\frac{5}{3}}dx - \lim_{R\to\infty}\int \chi_{B(R)}\frac{Z\rho_{TF}(x)}{|x|}dx \\
&\qquad + \lim_{R\to\infty}\frac{1}{2}\int \frac{\chi_{B(R)}(x)\rho_{TF}(x)\chi_{B(R)}(y)\rho_{TF}(y)}{|x-y|}dxdy \\
&= \mathscr{E}(\rho_{TF}) = E_{TF}.
\end{aligned}$$

以上 3 式より $\lim_{R\to\infty} E_R = E_{TF}$.

14.2　定理 3.3(2) の証明.

補題 14.1　E_R のミニマイザーを ρ_R とし, 定数 C があって,

$$||\rho_R||_{L^r(\mathbb{R}^3)} \leq C \ (\forall R \in (0,\ \infty),\ \forall r \in [1,\ \frac{5}{3}]).$$

(証明) 補題 4.12 を使って,

$$\mathscr{E}(\rho_R) \geq \frac{3}{5}\int \rho_R^{\frac{5}{3}} - \int \frac{\rho_R}{|x|}dx \geq \frac{3}{5}\int \rho_R^{\frac{5}{3}} - C'(\int \rho_R dx)^{\frac{1}{6}}(\int \rho_R^{\frac{5}{3}}dx)^{\frac{1}{2}}.$$

命題 13.1(1) の $E_R = \mathscr{E}(\rho_R) < 0$ に注意し, 定理 3.1(2) の $Z \geq \int \rho_R dx$, 次にヤングの不等式を使い,

$$\begin{aligned}
0 > \mathscr{E}(\rho_R) &\geq \frac{3}{5}\int \rho_R^{\frac{5}{3}}dx - C'Z^{\frac{1}{6}}(\int \rho_R^{\frac{5}{3}}dx)^{\frac{1}{2}} \\
&\geq \frac{3}{5}\int \rho_R^{\frac{5}{3}}dx - \frac{1}{2}\int \rho_R^{\frac{5}{3}}dx - \frac{1}{2}(C'Z^{\frac{1}{6}})^2 = \frac{1}{10}\int \rho_R^{\frac{5}{3}}dx - C.
\end{aligned}$$

これより R によらず ρ_R は $L^{\frac{5}{3}}$ 有界. また定理 3.1(2) の $Z \geq \int \rho_R dx$ から R によらず ρ_R は L^1 有界. 補間公式から $1 \leq r \leq \frac{5}{3}$ として, R によらず ρ_R は L^r 有界.

補題 14.2 $R_n \to \infty$ $(n \to \infty)$ のとき,

$$\rho_{R_n} \rightharpoonup \rho_{TF} \text{ in } L^r \ (1 < \forall r \le \frac{5}{3}).$$

(証明)

補題 14.1 より $1 < r \le \frac{5}{3}$ として, ある $\rho_0 \in L^r$ があって, $\{\rho_{R_n}\}_{n=1}^{\infty}$ の部分列があって, これも $\{\rho_{R_n}\}_{n=1}^{\infty}$ と表記すれば, 弱収束 $\rho_{R_n} \rightharpoonup \rho_0$ in L^r. また $\{\rho_{R_n}\}_{n=1}^{\infty} \subset \mathscr{T}_{R_n} \subset \mathscr{T}_{TF}$.

また $\tilde{\rho} \in L^1$ を背理法で示す. $\int \tilde{\rho} = \infty$ とすると, ある χ_A で $|A| < \infty$ かつ $\int \tilde{\rho}\chi_A dx > Z$ となる. ところが定理 3.1(2) より $Z \ge \int \rho_{R_n} dx$, また $\chi_A \in L^{\frac{5}{2}}$ なので, $Z \ge \lim_{n\to\infty} \int \rho_{R_n}\chi_A dx = \int \tilde{\rho}\chi_A dx$ となり矛盾.

以上で補題 4.18(3) の仮定を満たすので, $\rho_0 \in \mathscr{T}_{TF}$ かつ $\liminf_{n\to\infty} \mathscr{E}(\rho_{R_n}) \ge \mathscr{E}(\rho_0)$. 定理 2.3(1) の $\lim_{n\to\infty} \mathscr{E}(\rho_{R_n}) = \lim_{n\to\infty} E_{R_n} = E_{TF}$ と併せて $E_{TF} \ge \mathscr{E}(\rho_0)$.

逆に $\rho_0 \in \mathscr{T}_{TF}$ から $E_{TF} \le \mathscr{E}(\rho_0)$. 以上より ρ_0 は E_{TF} の一意のミニマイザー ρ_{TF} に等しい. 部分列の取り方によらず, ρ_{TF} に弱収束するので, もとの $\{\rho_{R_n}\}_{n=1}^{\infty}$ が ρ_{TF} に弱収束する.

定理 3.3(2) の証明.

$x \neq 0$ を固定し $R \to \infty$ とすれば十分大きい R では $|x| < R$ なので, このとき,

$$\begin{aligned}
\rho_R^{\frac{2}{3}}(x) &= \frac{Z}{|x|} - \int \frac{\rho_R(y)}{|x-y|} dy \\
&= \frac{Z}{|x|} - \int \frac{\rho_R(y)\chi_{\{|x-y|<1\}}}{|x-y|} dy - \int \frac{\rho_R(y)\chi_{\{|x-y|>1\}}}{|x-y|} dy.
\end{aligned}$$

$\frac{\chi_{\{|x-y|<1\}}}{|x-y|} \in L^{\frac{5}{2}}$ かつ $\frac{\chi_{\{|x-y|>1\}}}{|x-y|} \in L^4$ であり, 補題 14.2 より $R \to \infty$ で ρ_R は $L^{\frac{5}{3}}$ 弱収束かつ $L^{\frac{4}{3}}$ 弱収束なので,

$$\lim_{R\to\infty} \rho_R^{\frac{2}{3}}(x) = \frac{Z}{|x|} - \int \frac{\rho_{TF}(y)\chi_{\{|x-y|<1\}}}{|x-y|} dy - \int \frac{\rho_{TF}(y)\chi_{\{|x-y|>1\}}}{|x-y|} dy = \rho_{TF}^{\frac{2}{3}}(x).$$

よって

$$\lim_{R\to\infty} \rho_R(x) = \rho_{TF}(x) \ (x \in \mathbb{R}^3 \setminus \{0\}).$$

14.3 定理 3.3(3) の証明.

(証明) 任意の $\epsilon > 0$ に対し, ある r があって,

$$Z \ge \int \rho_{TF}\chi_{B(r)} dx > Z - \frac{\epsilon}{2}.$$

$\chi_{B(r)} \in L^{\frac{5}{2}}$ と $R \to \infty$ で ρ_R は ρ_{TF} に $L^{\frac{5}{3}}$ 弱収束するので,

$$\begin{aligned}
&\exists R_0 \ s.t.\ R \ge R_0 \text{ならば} \\
&\int \rho_{TF}\chi_{B(r)} dx + \frac{\epsilon}{2} > \int \rho_R \chi_{B(r)} dx > \int \rho_{TF}\chi_{B(r)} dx - \frac{\epsilon}{2}.
\end{aligned}$$

また定理 3.1(2) より

$$Z \geq \int \rho_R dx \geq \int \rho_R \chi_{B(r)} dx \ (\forall R > 0).$$

以上３点から,

$$R \geq R_0 \text{ならば } Z \geq \int \rho_R dx \geq \int \rho_R \chi_{B(r)} dx \geq \int \rho_{TF} \chi_{B(r)} dx - \frac{\epsilon}{2} > Z - \epsilon.$$

これより

$$\lim_{R\to\infty} \lambda_R = \lim_{R\to\infty} \int \rho_R(x) dx = Z.$$

14.4 定理 3.3(4) の証明.

(証明) 定理 3.4(1) より,

$$\lim_{R\to\infty} \mathscr{E}(\rho_R) = \mathscr{E}(\rho_{TF}).$$

補題 4.18(3) の証明中の式 (33) と補題 14.2 で示した $\rho_0 = \rho_{TF}$ から,

$$\lim_{R\to\infty} \int \frac{Z\rho_R}{|x|} dx = \int \frac{Z\rho_{TF}}{|x|} dx.$$

この２式から

$$\lim_{R\to\infty} (\frac{3}{5} \int \rho_R^{\frac{5}{3}} dx + D(\rho_R,\ \rho_R)) = \frac{3}{5} \int \rho_{TF}^{\frac{5}{3}} dx + D(\rho_{TF},\ \rho_{TF}). \tag{194}$$

補題 4.18(3) の証明中の式 (32), (35) と補題 14.2 で示した $\rho_0 = \rho_{TF}$ から,

$$\liminf_{R\to\infty} \frac{3}{5} \int \rho_R^{\frac{5}{3}} dx \geq \frac{3}{5} \int \rho_{TF}^{\frac{5}{3}} dx, \qquad \liminf_{R\to\infty} D(\rho_R,\ \rho_R) \geq D(\rho_{TF},\ \rho_{TF}). \tag{195}$$

(194), (195) から,

$$\lim_{R\to\infty} \frac{3}{5} \int \rho_R^{\frac{5}{3}} dx = \frac{3}{5} \int \rho_{TF}^{\frac{5}{3}} dx. \tag{196}$$

$R \to \infty$ で, 定理 2.4(2) より $\rho_R(x)$ は $\rho_{TF}(x)$ へ各点収束, また (196) より ρ_R は ρ_{TF} へ $L^{\frac{5}{3}}$ ノルム収束. また命題 7.2(7) から ρ_R は ρ_{TF} へ L^1 ノルム収束. 補題 4.19 から各点収束とノルム収束が同時にあれば強収束となるので, ρ_R は ρ_{TF} へ $L^{\frac{5}{3}}$ 強収束と L^1 強収束する. 補間公式から $1 \leq r \leq \frac{5}{3}$ で ρ_R は ρ_{TF} へ L^r 強収束する.

15 定理 3.4($R \to 0$ における漸近挙動) の証明.

定理 3.4(1) と定理 3.4(2) の証明.

定理 3.1(1) より,

$$\rho_R^{\frac{2}{3}}(x) = \frac{Z}{|x|} - \int \frac{\rho_R(y)}{|x-y|} dy.$$

となる. これより,

$$\frac{Z}{|x|} > \rho_R^{\frac{2}{3}}(x). \tag{197}$$

この 2 式から, そして次に補題 4.13 から,

$$\begin{aligned}\rho_R^{\frac{2}{3}}(x) &> \frac{Z}{|x|} - \int_{B(R)} \frac{Z^{\frac{3}{2}}}{|y|^{\frac{3}{2}}} \frac{1}{|x-y|} dy = \frac{Z}{|x|} - \int_{B(R)} \frac{Z^{\frac{3}{2}}}{|y|^{\frac{3}{2}}} \frac{dy}{\max\{|x|,\ |y|\}} \\ &\geq \frac{Z}{|x|} - \frac{Z^{\frac{3}{2}}}{|x|} \int_{B(R)} \frac{dy}{|y|^{\frac{3}{2}}} = \frac{Z}{|x|} - \frac{Z^{\frac{3}{2}}}{|x|}(\frac{8\pi}{3} R^{\frac{3}{2}}).\end{aligned} \tag{198}$$

式（197)（198) より,

$$(\frac{Z}{|x|})^{\frac{3}{2}} > \rho_R(x) > (\frac{Z}{|x|})^{\frac{3}{2}} (1 - \frac{8\pi Z^{\frac{1}{2}}}{3} R^{\frac{3}{2}})^{\frac{3}{2}} \ (x \in B(R)). \tag{199}$$

特に $R \to 0$ で,

$$\rho_R(x) = (\frac{Z}{|x|})^{\frac{3}{2}} (1 + O(R^{\frac{3}{2}})).$$

式（199) を $B(R)$ で積分すれば,

$$\frac{8\pi}{3}(ZR)^{\frac{3}{2}} > \lambda_R > \frac{8\pi}{3}(ZR)^{\frac{3}{2}}(1 - \frac{8\pi Z^{\frac{1}{2}}}{3} R^{\frac{3}{2}})^{\frac{3}{2}}.$$

特に $R \to 0$ で,

$$\lambda_R = \frac{8\pi}{3}(ZR)^{\frac{3}{2}} + O(R^3).$$

定理 3.4(3) の証明.

定理 2.4(1) から, $Z_R^* := Z(1 - \frac{8\pi Z^{\frac{1}{2}}}{3} R^{\frac{3}{2}})$ とおけば,

$$(\frac{Z}{|x|})^{\frac{3}{2}} > \rho_R(x) > (\frac{Z_R^*}{|x|})^{\frac{3}{2}}. \tag{200}$$

これより, $\mathscr{E}_K(\rho_R)$ は,

$$\frac{3}{5} \int_{B(R)} (\frac{Z}{|x|})^{\frac{5}{2}} dx > \mathscr{E}_K(\rho_R) > \frac{3}{5} \int_{B(R)} (\frac{Z_R^*}{|x|})^{\frac{5}{2}} dx.$$

積分計算し,

$$\frac{24\pi Z^{\frac{5}{2}}}{5} R^{\frac{1}{2}} > \mathscr{E}_K(\rho_R) > \frac{24\pi (Z_R^*)^{\frac{5}{2}}}{5} R^{\frac{1}{2}} = \frac{24\pi Z^{\frac{5}{2}}}{5} R^{\frac{1}{2}} (1 - \frac{8\pi Z^{\frac{1}{2}}}{3} R^{\frac{3}{2}})^{\frac{5}{2}}.$$

$R \to 0$ で,

$$\mathscr{E}_K(\rho_R) = \frac{24\pi Z^{\frac{5}{2}}}{5} R^{\frac{1}{2}} + O(R^2). \tag{201}$$

式 (200) より $\mathscr{E}_A(\rho_R)$ は,

$$-\int_{B(R)} (\frac{Z}{|x|})^{\frac{3}{2}} \frac{Z}{|x|} dx < \mathscr{E}_A(\rho_R) < -\int_{B(R)} (\frac{Z_R^*}{|x|})^{\frac{3}{2}} \frac{Z}{|x|} dx.$$

$\mathscr{E}_K(\rho_R)$ と同様に計算し,

$$\mathscr{E}_A(\rho_R) = -8\pi Z^{\frac{5}{2}} R^{\frac{1}{2}} + O(R^2). \tag{202}$$

式 (200) より $D(\rho_R,\ \rho_R)$ は,

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}\int_{B(R)^2} (\frac{Z}{|x|})^{\frac{3}{2}} (\frac{Z}{|y|})^{\frac{3}{2}} \frac{1}{|x-y|} dxdy \quad &> \quad D(\rho_R,\ \rho_R) \\ &> \quad \frac{1}{2}\int_{B(R)^2} (\frac{Z_R^*}{|x|})^{\frac{3}{2}} (\frac{Z_R^*}{|y|})^{\frac{3}{2}} \frac{1}{|x-y|} dxdy. \end{aligned}$$

変数変換 $x = Rz,\ y = Rw$ を行い,

$$C := \frac{1}{2}\int_{B(1)^2} (\frac{1}{|z|})^{\frac{3}{2}} (\frac{1}{|w|})^{\frac{3}{2}} \frac{1}{|z-w|} dzdw = \frac{52\pi^2}{3}$$

とおけば,

$$CZ^3R^2 > D(\rho_R,\ \rho_R) > C(Z_R^*)^3 R^2 = CZ^3R^2(1 - \frac{8\pi Z^{\frac{1}{2}}}{3} R^{\frac{3}{2}})^3,$$

$$D(\rho_R,\ \rho_R) = CZ^3R^2 + O(R^{\frac{7}{2}}). \tag{203}$$

$E_R = \mathscr{E}_K(\rho_R) + \mathscr{E}_A(\rho_R) + D(\rho_R,\ \rho_R)$ なので式 (201), (202), (203) から,

$$E_R = -\frac{16\pi Z^{\frac{5}{2}}}{5} R^{\frac{1}{2}} + O(R^2).$$

$\frac{dE_R}{dR} = \frac{1}{R}(3\mathscr{E}_K(\rho_R) + 2\mathscr{E}_A(\rho_R) + 5D(\rho_R,\ \rho_R))$ なので, 式 (201), (202), (203) から,

$$\frac{dE_R}{dR} = -\frac{8\pi Z^{\frac{5}{2}}}{5} R^{-\frac{1}{2}} + O(R).$$

16　定理 3.5 の証明.

(証明) $-E_R$ は, 命題 13.1(5) より $0 < R$ で R について狭義増加関数かつ C^1 級関数. 命題 13.1(1) より $R \to 0$ で 0 に収束する.

λ_R は, 命題 13.1(6) より $0 < R$ で R について狭義増加で, 命題 13.1(3) より R について連続関数. 定理 3.4(2) より $R \to 0$ で 0 に収束する.

各点 $x \in \mathbb{R}^3 \backslash \{0\}$ での電子密度 $\rho_R(x)$ は, 命題 13.1(2) より $0 < R$ で R について連続関数.

定理 3.4(3) より, エネルギー比は

$$-E_R : \mathscr{E}_K(\rho_R) : -\mathscr{E}_A(\rho_R) : D(\rho_R,\ \rho_R) \to 1 : \frac{3}{2} : \frac{5}{2} : 0\ (R \to 0)$$

17 参考文献

参考文献

[1] R. Benguria, H. Brezis and E. H. Lieb, The Thomas-Fermi-von Weizs*ä*cker theory of atoms and molecules. Commun. Math. Phys. 79(1981), pp. 167-180.

[2] H. Brezis, Functional Analysis, Sobolev Spaces and Partial differential equations, Springer (2010)

[3] L. C. Evans, Partial differential equations, American mathematical Society, Graduate Studies in Math. 19(1998)

[4] D. Gilbarg and N. Trudinger, Elliptic Partial Differential Equations of Second Order (3rd ed.), Springer (1997)

[5] E. H. Lieb and M. Loss, Analysis, American mathematical Society, Providence, RI, 2001

[6] E. H. Lieb and B. Simon, The Thomas-Fermi theory of atoms, molecules and solids, Advance in Math., 23(1977)pp. 22-116.

[7] P. -L. Lions, Solutions of Hartee-Fock equations for Coulomb systems, Commun. Math. Phys., 109(1987), pp. 33-97.

[8] 村田實, 倉田和浩, 楕円型・放物型偏微分方程式, 岩波書店, (2006)

[9] 中嶋貞雄, 超伝導入門, 培風館, (1971)

[10] P. T. Nam, Partial Differential Equations II Lecture Notes (unofficial).

[11] P. T. Nam and H. Van Den Bosch, Nonexistence in Thomas-Fermi-Dirac-von Weizs*ä*cker theory with small nuclear charges, Math. Phys. Anal. Geom. 20(2017), no. 2, Art. 6, 32pp. doi:10. 1007/s11040-017-9238-0

[12] 津野義道, 劣微分と最適問題, 牧野書店, (1997)

[13] 谷島賢二, [新版] ルベーグ積分と関数解析, 朝倉書店, (2015)